

DOCTORADO EN CIENCIA Y TECNOLOGÍA

Evaluable y acreditado por la Comisión Nacional de Evaluación y Acreditación
Universitaria (CONEAU). Resolución N°1178/11. Calificación "B".

Fenómenos de Transporte en un Sistema de Ratchets Acopladas

Trabajo de tesis para optar al título de Doctor en Ciencia y Tecnología de la
Universidad Nacional de General Sarmiento

Autora: Marcela Veronica Reale

Director de tesis: Dr. Alejandro Fendrik.
Consejera de Estudios: Dra. Lilia Romanelli

Lugar de trabajo: Instituto de Ciencias, Universidad Nacional de General Sar-
miento.

Buenos Aires, 21 de marzo de 2016.

DOCTORADO EN CIENCIA Y TECNOLOGIA

Evaluado y acreditado por la Comisión Nacional de Evaluación y Acreditación Universitaria (CONEAU). Resolución N° 1178/11. Calificación "B".

FORMULARIO "E" TESIS DE POSGRADO

Niveles de acceso al documento autorizados por el autor

El autor de la tesis puede elegir entre las siguientes posibilidades para autorizar a la UNGS a difundir el contenido de la tesis: a

- a) *Liberar el contenido de la tesis para acceso público.*
- b) *Liberar el contenido de la tesis solamente a la comunidad universitaria de la UNGS:*
- c) *Retener el contenido de la tesis por motivos de patentes, publicación y/o derechos de autor por un lapso de cinco años.*

a. Título completo del trabajo de Tesis: *Fenómenos de Transporte en un Sistema de Ratchets Acopladas*

b. Presentado por : Reale, Marcela Veronica

c. E-mail del autor: mreale@ungs.edu.ar

d. Estudiante del Posgrado: Doctorado en Ciencia y Tecnología

e. Institución o Instituciones que dictaron el Posgrado: Instituto de Ciencias, Universidad Nacional de General Sarmiento.

f. Para recibir el título de:

- a) Grado académico que se obtiene: Doctor
- b) Nombre del grado académico: Doctora en Ciencia y Tecnología

g. Fecha de la defensa: 21 / 03 / 2016

h. Director de la Tesis: Fendrik, Alejandro

i. Tutor de la Tesis: Romanelli, Lilia

j. Colaboradores con el trabajo de Tesis: -

k. Descripción física del trabajo de Tesis: 109 páginas (incluyendo el Formulario E), 35 figuras, 3 tablas.

l. Alcance geográfico y/o temporal de la Tesis: El alcance geográfico de la presente tesis es internacional mientras se investigue la aplicación de Ratchets en distintos fenómenos físicos y biológicos.

DOCTORADO EN CIENCIA Y TECNOLOGIA

Evaluado y acreditado por la Comisión Nacional de Evaluación y Acreditación Universitaria (CONEAU). *Resolución N° 1178/11. Calificación "B".*

m. Temas tratados en la Tesis: Ratchets, Movimiento Browniano, Ruido, Fenómenos de Transporte.

n. Resumen en español: Se estudian los fenómenos de transporte en un sistema unidimensional de partículas interactuantes. Este sistema está emplazado en un potencial periódico y con una asimetría izquierda-derecha impulsado por una fuerza externa periódica en el tiempo y el espacio. Se han encontrado, mediante la variación de diferentes parámetros, distintas trayectorias estacionarias. Las propiedades de transporte de estas órbitas son diferentes y es posible cuantificar sus valores. Además se estudiaron las órbitas con y sin la presencia de fluctuaciones térmicas y encontrándose inversiones en las corrientes debido a la adición de ruido Gaussiano blanco. Cuando la densidad (número de partículas por sitio) es un número entero, la corriente direccional de las partículas es colectiva. Por otro lado, cuando el sistema tiene un defecto, una nueva corriente localizada o no colectiva aparece debido a la migración de los defectos de un sitio a otro.

Palabras claves: Resonancia Estocástica; Ratchet; Movimiento Browniano; Motores Brownianos; Fenómenos de fluctuación; Procesos aleatorios; Ruido; Procesos de Transporte.

o. Resumen en portugués: Estuda-se os fenómenos de transporte de um sistema unidimensional de partículas que interagem. Este sistema é incorporado em um potencial periódico assimétrico de esquerda-direita impulsionado por uma força externa periódica no tempo e no espaço. Descobrimos, por modificação de diversos parâmetros, diferentes trajetórias estacionárias. As propriedades de transporte destas órbitas são diferentes e é possível quantificar seus valores. Também foram estudadas as órbitas com e sem a presença de flutuações térmicas e encontradas inversões de corrente devido à adição de ruído Gaussiano branco. Quando a densidade (número de partículas por local) é um número inteiro, a corrente direcional das partículas é coletiva. Por outro lado, quando o sistema apresenta um defeito, uma nova corrente localizada ou não coletiva aparece devido à migração dos defeitos de um local para outro.

Palavras-chave: Ressonância Estocástica; Ratchet; Movimento Browniano; Motor Browniano; Flutuação Fenômenos; Processos aleatórios; Ruído; Processos de Transporte.

p. Resumen en inglés: Transport phenomena in a one-dimensional system of interacting particles is studied. This system is embedded in a periodic and left-right asymmetric potential driven by a force periodic in time and space. We have found, by varying different parameters, several stationary trajectories. The transport properties of these orbits are quite different and their values are quantified. The symmetries allow us to study the orbits with and without the presence of thermal fluctuations and there is found current inversions due to the addition of white Gaussian noise. When the density (number of particles per site) is an integer, directional current of the particles is collective; that is, it involves the whole system since all the sites are equivalents. On the other hand, when the system has a defect, a new localized or noncollective current appears due to the migration of defects from one site to another.

DOCTORADO EN CIENCIA Y TECNOLOGIA

Evaluado y acreditado por la Comisión Nacional de Evaluación y Acreditación Universitaria (CONEAU). *Resolución N° 1178/11. Calificación "B".*

Keywords: Stochastic Resonance; Ratchet; Brownian motion; Brownian Motors; Fluctuation Phenomena; Random Processes; Noise; Transport Processes.

q. Aprobado por :

Dra. Ponce Dawson, Silvina

Dr. Perazzo, Roberto

Dr. Monastra, Alejandro

Firma y aclaración de la firma del Presidente del Jurado:

Firma del autor de la tesis:

DOCTORADO EN CIENCIA Y TECNOLOGIA

Evaluado y acreditado por la Comisión Nacional de Evaluación y Acreditación Universitaria (CONEAU). Resolución N° 1178/11. Calificación "B".

Fenómenos de Transporte en un Sistema de Ratchets Acopladas

Publicaciones:

- A.J. Fendrik, M. Reale and L. Romanelli, *Transport properties and current inversion by white Gaussian noise in a coupled ratchet model*, Physica **A 390**, 3932-3937, (2011).
- A. J. Fendrik, L. Romanelli and M. V. Reale, *Currents in defective coupled ratchets*, Physical Review **E 85**, 041149, (2012).

Aportes Originales:

La presente tesis aporta resultados originales sobre el estudio de los fenómenos de transporte en un sistema de ratchets acopladas. En el Capítulo 3, se presenta el modelo utilizado para describir la dinámica del sistema. En el siguiente Capítulo (4), teniendo en cuenta argumentos de simetría, se muestra una deducción de las posibles corrientes en el sistema tanto para el caso de densidad entera como para la no entera. Este análisis establece condiciones necesarias pero no suficientes que las corrientes deben cumplir. Luego, en los Capítulos 5 y 6, se muestra la dinámica del sistema en el plano Π_ϵ vs Π_k , con $\Pi_T = 0$, para diferentes densidades (enteras y no enteras) observándose diferentes corrientes, tanto en magnitud como en dirección. Por último, en el Capítulo 7 se describe el efecto del Ruido Gaussiano Blanco en la dinámica del sistema. En particular, se encontró que, cuando los parámetros del sistema determinista están en una región cercana a otra en la cual la órbita tiene una corriente opuesta, la adición de ruido puede provocar una inversión en la corriente.

Agradecimientos

A mis viejos y hermano por estar siempre presentes.

A Alejandro y a Lili por su paciencia, por sus consejos, por sus retos, por su pasión por enseñar.

Al jurado por leer esta tesis y por sus consejos para mejorarla.

A la Agencia Nacional de Promoción Científica y Tecnológica por financiar parte del Doctorado y mis viajes académicos.

A la Universidad Nacional de General Sarmiento, mi segundo hogar, por brindar la posibilidad y el espacio para formarme tanto como docente como investigadora. Y en particular, a todo el personal del Instituto de Ciencias y del Doctorado en Ciencia y Tecnología.

A los chicos de la Oficina 7130: Ariel, Cintia, David, Omar y Vanesa. Por nuestras charlas tan académicas como disparatadas.

A mis amigos (en orden alfabético así no se me ofenden): Andrea Paul, Cecilia Chosco Diaz, Julieta Matteucci, Leila Zanette, Tamara Bottazzi, Viviana Colella, y a aquellas personas que me estoy olvidando que siempre tuvieron palabras de apoyo en aquellos momentos complicados.

A los docentes del Área de Matemática y a los del Área de Computación del Instituto de Ciencias, por su confianza para desarrollar mi tarea docente.

A todos mis estudiantes, por su paciencia y su complicidad en el aula.

A vos cosa, por cambiar mi vida. Gran parte del empujón final se debe a tu presencia.

*¿Cómo penetrar los intersticios profundos de la sabiduría,
fusionarme en la mirada más allá del tiempo,
descifrar cada símbolo secreto,
arrollar la insistencia de sentirme ajena?*

*Leila Zanette,
mi amiga y la hermana que la vida me regalo.*

Índice general

Lista de figuras	11
1 Introducción	1
2 Preliminares	5
2.1 Movimiento browniano	6
2.1.1 Deducción de Einstein	6
2.1.2 Ecuación de Langevin	9
2.2 Ratchet	11
2.2.1 Efecto Ratchet	13
2.2.2 Tipos de Rachets	13
2.3 Ruido	15
2.3.1 Resonancia estocástica	16
2.3.2 Ruido Blanco	19
2.4 Modelo de Frenkel-Kontorowa	21
3 Modelo	25
3.1 Potencial de Ratchet	26
3.2 Forzante Externo	27
3.3 Potencial de interacción	27
3.4 Ruido Térmico	28
3.5 Constantes Adimensionales	29
4 Las Posibles Corrientes	31



4.1	Densidad Entera	32
4.2	Densidad No Entera	34
5	Las órbitas estacionarias para el sistema perfecto	39
6	Las órbitas estacionarias para el sistema defectuoso	45
7	El efecto del Ruido	49
8	Conclusiones	55
	Apéndices	59
A	Coeficiente de Difusión	61
B	Proceso de Wiener	65
C	Inclusión del Carozo Duro	69
	Bibliografía	71
	Índice alfabético	77

Índice de figuras

2.1	Cuando se aplica una diferencia de Voltajes en los electrodos, se genera un potencial periódico pero anisotrópico.	7
2.2	<i>a)</i> Esquema del modelo cuando los electrodos están encendidos. <i>b)</i> al momento de apagar los electrodos, las partículas pueden difundir libremente. <i>c)</i> Al encender nuevamente los electrodos, algunas partículas regresan a la misma posición y otras pueden avanzar hacia el siguiente electrodo.	8
2.3	El sistema de Ratchet, dientes de sierra, está unido mediante un eje a las paletas y a una polea que puede elevar una carga. [1]	12
2.4	Sistema idéntico al anterior pero en que la ratchet y la traba se encuentran a una temperatura diferente que las paletas.[1]	13
2.5	Potencial de doble pozo, con mínimos en $+c$ y $-c$ con $c = \sqrt{a/b}$. Los mínimos están separados por una barrera de potencial de altura V_0	17
2.6	Forzante externo (en línea punteada) y la órbita ruidosa de una partícula para diferentes intensidades de ruido: <i>a)</i> Cuando la intensidad del ruido es baja, las transiciones entre ambos mínimos son pocas por lo que la partícula permanece más tiempo en alguno de ellos; <i>b)</i> Para una intensidad de ruido óptima, la transición entre mínimos está sincronizada con el forzante externo; <i>c)</i> si la intensidad del ruido es alta, las transiciones son demasiadas perdiéndose la sincronización con el forzante externo.	18



2.7	Secuencia del efecto cooperativo del forzante externo y de un nivel adecuado de ruido sobre el potencial $V(x)$	18
2.8	Representación típica del modelo de Frenkel-Kontorova: Una cadena de partículas que interactúan a través de resortes armónicos de constante elástica k en presencia de un potencial externo de periodo p	21
3.1	Las partículas se ubican a lo largo de un anillo de longitud L . Las mismas interactúan mediante un potencial armónico V^{osc} a primeros vecinos y cada una está afectada por una fuente de ruido térmico $\xi_i(t)$	26
3.2	Potencial de Ratchet V_α vs. X (posición en el anillo) para $a)\alpha = 3$ y $b)\alpha = \frac{1}{3}$	27
3.3	F^{ext} vs. X (posición en el anillo) para $\varepsilon = 10$ y $a)t = \frac{\tau}{4}$ y $b)t = \frac{3\tau}{4}$ con $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$	27
3.4	Potencial total $V(x, t) = V_\alpha(x) + V^{ext}(x, t)$ para $a)t = 0$, $b)t = \frac{\tau}{4}$, $c)t = \frac{\tau}{2}$ y $d)t = \frac{3\tau}{4}$ con $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$	28
4.1	Cuando la densidad ρ es un entero, (Panel (a), $\rho = 5$) la configuración del equilibrio estático ($\Pi_\varepsilon = 0$) muestra el mismo número de partículas en cada sitio, es decir, una red perfecta. Cuando ρ no es entero, la configuración es defectuosa (Panel (b), $\rho = 5.25$). La flecha indica la partícula extra en el segundo sitio (un intersticial). En el Panel (c) se muestra el potencial de ratchet estático para $\alpha = 1/3$	38
5.1	Diagrama de Fase de la dinámica en el plano Π_ε vs. Π_k para $\Pi_T = 0$ para el caso $\rho = 2$. El número en cada región indica la velocidad promedio (temporal) $\bar{v}$ de [59].	40

- 5.2 Caso $\rho = 2$: Órbitas deterministas para: (a) $\Pi_\varepsilon = 5$ y $\Pi_k = 0.25$ con $\bar{v} = -2$; (b) $\Pi_\varepsilon = 5$ y $\Pi_k = 0.5$ con $\bar{v} = -1$; (c) $\Pi_\varepsilon = 2.1$ y $\Pi_k = 0.5$ con $\bar{v} = -1$; (d) $\Pi_\varepsilon = 5$ y $\Pi_k = 0.85$ con $\bar{v} = 0$; (e) $\Pi_\varepsilon = 2.1$ y $\Pi_k = 0.85$ con $\bar{v} = 0$; (f) $\Pi_\varepsilon = 1$ y $\Pi_k = 0.5$ con $\bar{v} = 0$; (g) $\Pi_\varepsilon = 5$ y $\Pi_k = 1.25$ con $\bar{v} = 1$; (h) $\Pi_\varepsilon = 2.1$ y $\Pi_k = 1.25$ con $\bar{v} = 1$ 41
- 5.3 Diagrama de Fase de la dinámica en el plano Π_ε vs. Π_k para $\Pi_T = 0$ para el caso $\rho = 5$. El número en cada región indica la velocidad promedio (temporal) $\bar{v}$. Las ventanas punteadas indican regiones ampliadas en las figuras 5.4 y 5.5 41
- 5.4 Zoom al diagrama de fase de la dinámica en el plano Π_ε vs. Π_k correspondiente al marco punteado indicado en la figura 5.3 42
- 5.5 Zoom al diagrama de fase de la dinámica en el plano Π_ε vs. Π_k correspondiente al 2° marco indicado en la figura 5.3. Las ventanas punteadas indican regiones ampliadas en la figura 5.6 42
- 5.6 a) Zoom al diagrama de fase de la dinámica en el plano Π_ε vs. Π_k correspondiente al marco punteado indicado en la figura 5.5. b) Zoom al diagrama de fase de la dinámica en el plano Π_ε vs. Π_k correspondiente al 2° marco indicado en la figura 5.5. 42
- 5.7 Caso $\rho = 5$: Órbitas deterministas de las partículas 1 (negro), 6 (rojo), 11 (verde) y 16 (azul) para: (a) $\Pi_\varepsilon = 1.5$ y $\Pi_k = 0.1$ con $\bar{v} = 0$; (b) $\Pi_\varepsilon = 1.6$ y $\Pi_k = 0.155$ con $\bar{v} = -0.4$; (c) $\Pi_\varepsilon = 1.55$ y $\Pi_k = 0.17$ con $\bar{v} = 0.4$; (d) $\Pi_\varepsilon = 0.96$ y $\Pi_k = 0.17$ con $\bar{v} = 0.4$; (e) $\Pi_\varepsilon = 1.47$ y $\Pi_k = 0.18$ con $\bar{v} = 1.2$; (f) $\Pi_\varepsilon = 1.1$ y $\Pi_k = 0.18$ con $\bar{v} = 1.2$ 43
- 6.1 Diagrama de fase de la dinámica en el plano Π_k vs. Π_ε para $\Pi_T = 0$ y $\rho = 9/4$ 45
- 6.2 Caso $\rho = 9/4$: Órbitas deterministas para: (a) $\Pi_\varepsilon = 1$ y $\Pi_k = 0.4$ con $\bar{v} = 0$; (b) $\Pi_\varepsilon = 3$ y $\Pi_k = 0.1$ con $\bar{v} = -2$; (c) $\Pi_\varepsilon = 2$ y $\Pi_k = 0.75$ con $\bar{v} = 2/9$; (d) $\Pi_\varepsilon = 2$ y $\Pi_k = 0.65$ con $\bar{v} = -2/9$; (e) $\Pi_\varepsilon = 3$ y $\Pi_k = 0.9$ con $\bar{v} = 10/9$; (f) $\Pi_\varepsilon = 3$ y $\Pi_k = 0.4$ con $\bar{v} = -10/9$ 46



- 6.3 Diagrama de fase de la dinámica en el plano Π_k vs. Π_ϵ para $\Pi_T = 0$ y $\rho = 21/4$ 46
- 6.4 Caso $\rho = 21/4$: Órbitas deterministas de las partículas 1 (negro), 6 (rojo), 11 (verde) y 16 (azul) para: (a) $\Pi_\epsilon = 1.54$ y $\Pi_k = 0.145$ con $\bar{v} = -\frac{2}{21}$; (b) $\Pi_\epsilon = 1.54$ y $\Pi_k = 0.153$ con $\bar{v} = \frac{2}{21}$; (c) $\Pi_\epsilon = 1.52$ y $\Pi_k = 0.14$ con $\bar{v} = -\frac{10}{21}$; (d) $\Pi_\epsilon = 1.52$ y $\Pi_k = 0.155$ con $\bar{v} = \frac{10}{21}$; (e) $\Pi_\epsilon = 1.12$ y $\Pi_k = 0.17$ con $\bar{v} = \frac{30}{21}$; (f) $\Pi_\epsilon = 1.3$ y $\Pi_k = 0.17$ con $\bar{v} = \frac{34}{21}$ 47
- 7.1 Para el caso $N = 20$, $s = 4$ se muestra la velocidad promedio $\langle \bar{v} \rangle$ (sobre 20 realizaciones) vs. la intensidad de ruido Π_T para los parámetros: (a) $\Pi_k = 0.15$, $\Pi_\epsilon = 1.425$; (b) $\Pi_k = 0.155$, $\Pi_\epsilon = 1.430$; (c) $\Pi_k = 0.158$, $\Pi_\epsilon = 1.422$. Las flechas (etiquetadas e, f, g, y h) indican los valores de ruido correspondientes a las órbitas típicas mostradas en la figura 7.2. 51
- 7.2 Posición en el anillo de una partícula en función de t/τ para $N = 20$, $s = 4$. Las trayectorias deterministas para $\Pi_k = 0.158$ y : (a) $\Pi_\epsilon = 1.422$ y $\bar{v} = 1$; (b) $\Pi_\epsilon = 1.4448$ y $\bar{v} = 0.4$; (c) $\Pi_\epsilon = 1.5$ y $\bar{v} = 0$; (d) $\Pi_\epsilon = 1.6$ y $\bar{v} = -0.4$. Para $\Pi_k = 0.158$ y $\Pi_\epsilon = 1.158$, las trayectorias ruidosas con: (e) $\Pi_T = 0.01032$; (f) $\Pi_T = 0.0725$, (g) $\Pi_T = 0.1386$; (h) $\Pi_T = 0.4$ 51
- 7.3 Órbitas para $N = 9$, $s = 4$: (a) órbita determinista, $\Pi_T = 0$, $\Pi_k = 0.7348$, $\Pi_\epsilon = 3.0$ y $\bar{v} = 2/9$; (b) órbita ruidosa $\Pi_T = 0.15$, $\Pi_k = 0.7348$, $\Pi_\epsilon = 3.0$; (c) órbita determinista, $\Pi_T = 0$, $\Pi_k = 0.7348$, $\Pi_\epsilon = 3.35$ y $\bar{v} = -2/9$. Al agregar ruido Gaussiano en (a) se obtiene (b) que reproduce (c), invirtiendo la corriente. 53
- 7.4 Órbitas para $N = 21$, $s = 4$: (a) órbita determinista, $\Pi_T = 0$, $\Pi_k = 0.1487$, $\Pi_\epsilon = 1.561$ y $\bar{v} = 2/21$; (b) órbita determinista, $\Pi_T = 0$, $\Pi_k = 0.1487$, $\Pi_\epsilon = 1.59$ y $\bar{v} = -2/21$ 53

7.5	Para el caso $N = 21$, $s = 4$ se muestra la velocidad promedio $\langle \bar{v} \rangle$ (sobre 20 realizaciones) vs. la intensidad de ruido Π_T para los parámetros $\Pi_k = 0.1487$ y $\Pi_\epsilon = 1.561$. Las flechas (etiquetadas b, c y d) indican los valores de ruido correspondientes a las órbitas típicas mostradas en la figura 7.6.	54
7.6	Posición en el anillo de una partícula en función de t/τ para $N = 21$, $s = 4$. (a) La órbita determinista $\Pi_T = 0$. (b) Órbita típica correspondiente al máximo, $\Pi_T = 0.02048$. (c) Órbita típica $\bar{v} = 0$ ($\Pi_T = 0.068445$). (d) Órbita típica en la cual el ruido induce una inversión de corriente, $\Pi_T = 0.120125$	54
B.1	Una realización típica del Proceso de Wiener realizado con una caminata aleatoria (<i>random walk</i>).	67
B.2	Gráfico de la función $\min(t_1, t_2)$ con t_1 fijo.	68
B.3	Gráfico de la función $-\min(t_1, t_2)$ con t_1 fijo. Equivalente a la gráfica de una función rampa.	68
C.1	Esquema de dos partículas de radio r	70
C.2	(a) Simulación para ocho partículas no interactuantes sin que sean afectadas por un forzante externo. (b) Simulación para ocho partículas no interactuantes con ruido blanco.	70

Capítulo 1

Introducción

El efecto ratchet consiste en un conjunto de partículas, interactuantes o no, lejos del equilibrio que pueden generar una corriente direccional aún cuando las fuerzas que actúan sobre ellas tenga valor medio cero, esto se produce debido a las asimetrías espacio-temporales que presenta el potencial [1, 2]. También se lo suele definir como aquellos artefactos no lineales creados de tal manera que favorecen el movimiento de una señal, información, partículas, etc en un sentido y no en el otro [3, 4].

Desde que se inició el estudio de las ratchets [5, 6], este tipo de sistemas fue utilizado en distintos campos [7, 8, 9, 10, 11] para desarrollar modelos de transporte en sistemas biológicos. Por ejemplo, permite explicar como ciertas enzimas exonucleasas actúan en la replicación, reparación y recombinación del ADN siguiendo una dirección determinada: comienzan desde el extremo de la cadena y van hacia el interior de la misma [12]. Como así también, el modelo de ratchet acopladas permite diseñar micromáquinas que transportan ADN mediante una ratchet Browniana que rectifica el movimiento browniano de las partículas microscópicas; creándose así Ratchet Brownianas experimentales mediante dielectroforesis, trampas ópticas o fuerzas electrocapilares [13].

En las últimas décadas, el estudio del comportamiento de las biomoléculas ha crecido enormemente y, en particular, las ratchets permiten modelizar la manera en que se trasladan de una célula a otra. Estos fenómenos de transporte para este



tipo de moléculas juegan un rol muy importante para el desarrollo y crecimiento de las células [14, 15, 16, 17].

A su vez, el modelo de ratchets inspiró el diseño de diferentes artefactos clásicos (tales como el transporte de fluxón¹ en superconductores) o cuánticos (por ejemplo ratchets de puntos cuánticos que son arreglos de rectificadores cuánticos asimétricos que trabajan en una escala de algunos nanómetros a micrones) [18].

En este trabajo se estudia la dinámica en ratchets acopladas deterministas inspiradas en el Modelo Frenkel-Kontorowa (FK) [19]. Más precisamente, se trata de un modelo FK impulsado y subamortiguado. Este tipo de modelización fue extensamente utilizado para describir unos cuantos fenómenos y sistemas físicos [20].

El sistema determinista está conformado por partículas interactuantes emplazadas en un potencial de ratchet afectadas por un forzante externo. Se variaron diversos parámetros del sistema tales como la densidad, la constante de acoplamiento y la intensidad del forzante externo. La característica principal de este sistema es el gran número de órbitas estacionarias que presenta a medida que los parámetros varían. Estas órbitas pueden ser bastante diferentes entre sí, y en particular el flujo puede cambiar en su dirección. Cada órbita estacionaria define regiones específicas en el espacio de parámetros separadas por curvas bien definidas (separatrices). Por otro lado, se encontraron condiciones necesarias para poder determinar los posibles valores de las corrientes teniendo en cuenta sólo argumentos de simetría sobre el potencial de ratchet sin considerar la interacción de las partículas.

La adición de ruido en cantidades moderadas en el sistema determinista no tiene un efecto de desorden como se espera, sino tiene un efecto constructivo sobre el mismo, tal como se observó en los resonadores estocásticos [21] o en las ratchets Brownianas [1]. Vale la pena mencionar que bajo ciertas condiciones apropiadas, por ejemplo de multiestabilidad, la inclusión de ruido lleva a disminuir el exponente de Lyapunov de una ratchet determinista [22] o puede realzar la estabilidad de las órbitas [23]. A partir de esto, surge la inquietud acerca de si

¹Es un cuanto de Flujo Magnético.

es posible revertir la corriente en la ratchet determinista con la simple adición de ruido. Recientemente, se realizaron algunos trabajos en esta cuestión, utilizando ruido coloreado o bien fuentes de ruido de correlación cruzada. [24, 25, 26]

En este trabajo se muestra que la dinámica determinista de este sistema es robusta bajo la presencia de una cantidad moderada de ruido no correlacionado, lo que puede inducir transiciones entre los diferentes tipos de órbitas estacionarias. Esto significa que, si el sistema determinista tiene una corriente direccional para un cierto conjunto de parámetros, la adición de ruido blanco puede cambiar o bien mezclar éstas órbitas con otras de una región del espacio de parámetros diferente. Es importante señalar que ciertos autores [27, 28, 29] sostienen que los sistemas compuestos por ratchets acopladas tienen la capacidad de invertir la corriente a través de la variación de algunos de los parámetros que modifican la simetría del potencial y por lo tanto la dirección de la corriente.

Esta tesis se organiza de la siguiente manera: para la comprensión de los temas, en el Capítulo 2 se presentan contenidos preliminares sobre Movimiento Browniano, Ratchets, Ruido y el modelo de Frenkel-Kontorova ; en el Capítulo 3, se realiza una descripción del modelo utilizado; en el Capítulo 4, se presenta un análisis analítico de las corrientes estacionarias; los Capítulos 5 y 6 se dedican a realizar una descripción de las órbitas estacionarias en el espacio de parámetros para un sistema perfecto y otro que no lo es, respectivamente; en el Capítulo 7 se muestra el comportamiento del sistema en presencia de ruido Gaussiano blanco; y por último se presentan las conclusiones y futuros trabajos en el Capítulo 8.

Capítulo 2

Preliminares

En este trabajo nos concentraremos en los fenómenos de transporte asociados a sistemas en donde actúa un potencial especial, potencial de Ratchet. En particular, si estos sistemas están conformados por partículas microscópicas o nanoscópicas, es decir, sistemas de pequeña escala, las fluctuaciones térmicas juegan un importante rol (muchas veces dominante) en el movimiento de estas partículas [1] (a este tipo de partículas se las suele llamar partículas Brownianas), por lo que, además, se estudiará la evolución y robustez del sistema en presencia de ruido.

Esta modelización se la puede vincular con, por ejemplo, los motores brownianos. Estos motores consisten partículas Brownianas que se mueven en un potencial asimétrico, necesario para obtener movimiento sistemático, y están sujetos a fluctuaciones no termales. [30, 31, 32] En las siguientes secciones, se ampliarán algunos de estos conceptos y se mostrará el modelo que sirvió de inspiración para este trabajo.



2.1. Movimiento browniano

En 1827, el botánico Robert Brown al mirar partículas de polen suspendidas en agua, notó que las mismas, de manera individual, se movían de manera continua pero irregular. Repitió varias veces el mismo experimento con distintos tipos de partículas observando el mismo fenómeno. De esta manera, llegó a la conclusión de que cualquier partícula suspendida en cualquier medio fluido (aire o agua), los átomos o las moléculas que componen el fluido chocan aleatoriamente con la partícula desde diferentes direcciones, en diferentes momentos y cantidades. A simple vista no se puede distinguir el efecto del choque una única molécula pero si se puede notar el efecto causado por los impactos de varias moléculas en un período de tiempo [33, 34]. De allí surge el fenómeno conocido como *Movimiento Browniano*.

Este fenómeno, en principio, no podría usarse para separar partículas; sin embargo, si las propiedades del medio depende de la dirección (medio anisótropo) este movimiento puede ser direccionado [13, 35]. Por ejemplo, si se tiene una partícula cargada que se puede mover en un arreglo de electrodos espaciados periódicamente, tal como se muestra en la figura 2.1:

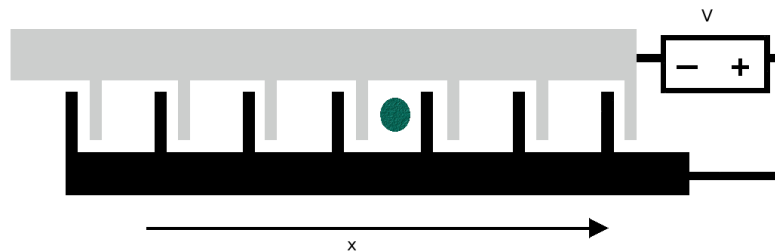


Figura 2.1: Cuando se aplica una diferencia de Voltajes en los electrodos, se genera un potencial periódico pero anisotrópico.

Cuando se aplica el voltaje, la energía potencial se parece a una función diente de sierra anisotrópica. El campo eléctrico en la dirección x es 0, por lo que una fluctuación de no equilibrio, que se puede generar al encender y apagar el artefacto, generaría un flujo (ver figura 2.2).

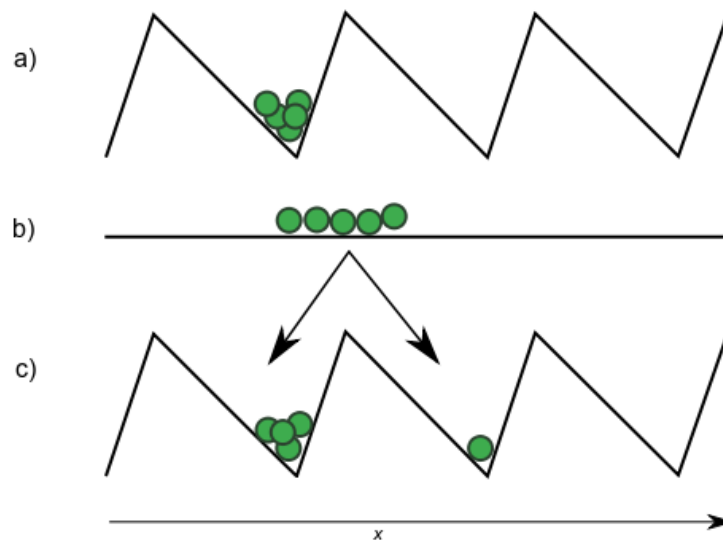


Figura 2.2: *a)* Esquema del modelo cuando los electrodos están encendidos. *b)* al momento de apagar los electrodos, las partículas pueden difundir libremente. *c)* Al encender nuevamente los electrodos, algunas partículas regresan a la misma posición y otras pueden avanzar hacia el siguiente electrodo.

A continuación se presenta dos deducciones diferentes para el movimiento Browniano: la de Einstein y la de Langevin.

2.1.1. Deducción de Einstein

En 1905, Albert Einstein centro su deducción sobre el movimiento browniano en una descripción probabilística de la distribución de las partículas, como ensemble, en el líquido y no en la trayectoria de una partícula.

En su artículo titulado *Sobre el movimiento requerido por la teoría cinética molecular del calor de pequeñas partículas suspendidas en un líquido estacionario*¹ [36], Einstein deduce una expresión para el coeficiente de difusión D que depende del radio de las partículas suspendidas, de la temperatura y de la viscosidad,

¹En alemán: Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen.



$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta a}$$

siendo k_B la constante de Boltzmann, T la temperatura, η es la viscosidad y a el radio de las partículas. Mayores detalles sobre como Einstein obtiene esta última expresión se encuentran en el Anexo A.

La idea primordial para comprender esta deducción sobre el Movimiento Browniano consiste en tomar un intervalo de tiempo τ . Este tiempo es pequeño comparado con el tiempo de observación, pero es lo suficientemente grande como para asumir que los movimientos hechos por una partícula en dos intervalos consecutivos (de tiempo τ) son independientes. Sea n la cantidad de partículas suspendidas en el líquido y $f(x, t)$ el número de partículas por unidad de volumen. Esta última función permite encontrar la distribución de las partículas a $t + \tau$ desde la distribución a tiempo t . Realizando diferentes expansiones y suposiciones, Einstein llegó a una ecuación diferencial para la difusión siendo D el coeficiente de difusión:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \quad (2.1)$$

Ahora bien, asumiendo que las partículas son independientes, se puede utilizar como origen de sistema de coordenadas a la posición del centro de masa de las mismas en $t_0 = 0$. De esta manera $f(x, t) dx$ indica la cantidad de partículas cuya coordenada x se ha incrementado entre los tiempos $t_0 = 0$ y $t_1 = t$ por una cantidad que está entre x y $x + dx$.

Como f tiene que satisfacer (2.1), y, si $x \neq 0$, las condiciones

$$f(x, 0) = 0$$

y

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x, 0) dx = n$$

conducen a que la función de densidad de probabilidad, solución de 2.1, debe ser:

$$f(x, t) = \frac{n}{\sqrt{4\pi D}} \frac{e^{-\frac{x^2}{4Dt}}}{\sqrt{t}} \quad (2.2)$$

Pues bien, si se calcula el desplazamiento cuadrático medio en la dirección del eje x se obtiene

$$\langle x^2(t) \rangle = 2Dt \quad (2.3)$$

De esta manera, el desplazamiento medio es proporcional a la raíz cuadrada del tiempo.

2.1.2. Ecuación de Langevin

En 1908, Paul Langevin presentó su versión de una ecuación que describe el fenómeno del movimiento Browniano [37]. Langevin se basó en la trayectoria de una única partícula Browniana y escribió las ecuaciones de Newton para ella: Fuerza igual la masa por la aceleración. Él conocía que la trayectoria de la partícula Browniana era errática, consideró que sobre la partícula actuaban dos tipos de fuerzas: una de fricción (sería proporcional a la velocidad según la Ley de Stokes²) y una fuerza fluctuante $\vec{\xi}(t)$ que representaría la parte errática de la fuerza proveniente de las moléculas del fluido.

De este modo, la ecuación de movimiento de una partícula es:

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -6\pi\eta a \vec{v} + \vec{\xi} \quad (2.4)$$

donde η es el coeficiente de viscosidad, a es el radio de la partícula Browniana (se supone que es esférica).

Langevin asumió dos cuestiones sobre la fuerza errática $\vec{\xi}(t)$: tiene media 0 y no está correlacionada con la posición actual de la partícula. Es decir,

$$\begin{cases} \langle \vec{\xi}(t) \rangle = 0 \\ \langle \vec{x}(t) \cdot \vec{\xi}(t) \rangle = \langle \vec{x}(t) \rangle \cdot \langle \vec{\xi}(t) \rangle = 0 \end{cases} \quad (2.5)$$

²Para objetos pequeños, la fuerza de rozamiento que sufre una partícula de radio a inmersa en un fluido es

$$F_r = 6\pi a \eta v$$

donde η es la viscosidad del fluido y v es la velocidad de la partícula.



Ahora bien, multiplicando la ecuación (2.4) por $\vec{x}$ y tomando promedio sobre todas las realizaciones de $\vec{\zeta}(t)$, se obtiene

$$\begin{aligned} m \frac{d\vec{v}}{dt} &= -6\pi\eta a \vec{v} + \vec{\zeta} \\ m \frac{d\vec{v}}{dt} \vec{x} &= -6\pi\eta a \vec{v} \vec{x} + \vec{\zeta} \vec{x} \\ m \left\langle \frac{d\vec{v}}{dt} \vec{x} \right\rangle &= -6\pi\eta a \langle \vec{v} \vec{x} \rangle + \langle \vec{\zeta} \vec{x} \rangle \end{aligned} \quad (2.6)$$

llegando a

$$\frac{m}{2} \frac{d^2 \langle \vec{x}^2 \rangle}{dt^2} = m \langle \vec{v}^2 \rangle - 3\pi\eta a \frac{d \langle \vec{x}^2 \rangle}{dt} \quad (2.7)$$

puesto se considera las condiciones de (2.5) y que los términos $\left\langle \vec{x} \frac{d\vec{x}}{dt} \right\rangle$ y $\left\langle \vec{x} \frac{d^2 \vec{x}}{dt^2} \right\rangle$ se pueden reescribir como $\frac{1}{2} \left\langle \frac{d \vec{x}^2}{dt} \right\rangle$ y $\frac{1}{2} \left\langle \frac{d^2 \vec{x}^2}{dt^2} \right\rangle - \langle \vec{v}^2 \rangle$ respectivamente.

Por otro lado, Langevin también asumió que la partícula Browniana y el fluido en el que está inmersa están en equilibrio térmico. Lo que implica que la energía cinética promedio de la partícula es $\left\langle \frac{m \vec{v}^2}{2} \right\rangle = \frac{3k_B T}{2}$, siendo k_B la constante de Boltzmann y T la temperatura del fluido.

Si se resuelve la ecuación (2.7), se obtiene que la partícula, en promedio, no se mueve y que luego de cierto tiempo, el promedio de la posición al cuadrado está dado por:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}(t) \rangle &= 0 \\ \langle \vec{x}(t)^2 \rangle &= \frac{k_B T}{3\pi\eta a} t \end{aligned} \quad (2.8)$$

Obteniendo así una expresión para el coeficiente de difusión

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta a}. \quad (2.9)$$

coincidente con el resultado de Einstein.

En esta tesis, teniendo en cuenta que se estudiarán los fenómenos de transporte en un sistema particular, se trabaja con la ecuación deducida por Langevin debido a que ésta modeliza la posición de la partícula de manera individual lo que

permite tener una mayor comprensión del fenómeno al poder observar/simular como se comportan las órbitas de las partículas.

2.2. Ratchet

Se llaman *ratchet brownianas* a aquellos sistemas que producen una corriente en la red sin una fuerza externa, sólo utilizando las fluctuaciones de noequilibrio [38]. Un ejemplo de esto se puede observar en la figura 2.3 en donde las colisiones aleatorias de las moléculas de gas sobre las paletas provocan un movimiento rotatorio browniano, pero la traba rectifica este movimiento y permite elevar la carga [1].

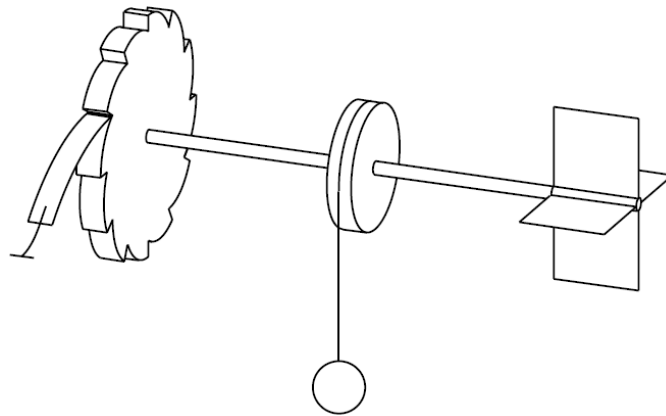


Figura 2.3: El sistema de Ratchet, dientes de sierra, está unido mediante un eje a las paletas y a una polea que puede elevar una carga. [1]

El artefacto está rodeado por gas en equilibrio térmico. Por lo que el impacto aleatorios de las moléculas de gas en las paletas podrían producir un movimiento browniano, pero esto implicaría tener un móvil perpetuo lo que contradice la Segunda Ley de la Termodinámica³. Una ampliación de este experimento es presentado por Feynman en uno de sus trabajos [6]: El gas alrededor de las paletas y

³El enunciado de Kelvin-Planck sobre la Segunda Ley de la Termodinámica dice lo siguiente: Es imposible construir un artefacto que opere cíclicamente, cuyo único efecto sea absorber el calor de una fuente de temperatura y convertirlo en una cantidad equivalente de trabajo.



del ratchet no deben estar a la misma temperatura, tal como se indica en la figura 2.4.

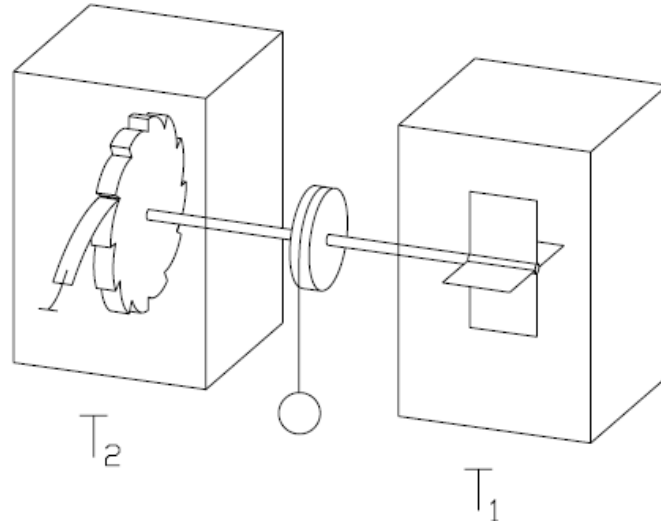


Figura 2.4: Sistema idéntico al anterior pero en que la ratchet y la traba se encuentran a una temperatura diferente que las paletas.[1]

Si $T_1 > T_2$, es decir, que las paletas se encuentran a mayor temperatura que la ratchet, el movimiento que resultante coincide con la intuición: la carga es elevada. En cambio, si $T_1 < T_2$ el movimiento es el inverso: la carga descende.

2.2.1. Efecto Ratchet

Se llama *Efecto Ratchet* a utilizar las fluctuaciones aleatorias en trabajo útil. Este efecto se lo ha aplicado en distintos tipos de fenómenos, tales como: para establecer un mecanismo de separación de partículas [15]; para remover vórtices de superconductores (estos últimos se usan, por ejemplo, como sensores para instrumentos de medición y los vórtices disipan energía y generan ruido interno) y suavizar superficies [39]; o bien simplemente para describir el transporte direccional de gotas de agua en las alas de mariposa [40].

2.2.2. Tipos de Ratchets

Para tener un sistema en donde se considere el efecto de ratchet, se debe tener las siguientes consideraciones:

- i. Tener una periodicidad espacial y una periodicidad bajo la traslación en el tiempo.
- ii. Todas las fuerzas tienen que desvanecerse al promediar sobre el tiempo, sobre el espacio, y sobre ensambles estadísticos al tener fluctuaciones aleatorias.
- iii. El sistema tiene que ser permanentemente alejado del equilibrio termal pero no tiene que haber ninguna simetría que prohíba el efecto de ratchet de antemano.
- iv. Tener una cantidad finita de ruido termal

Teniendo en cuenta estas cuestiones, el modelo básico de una dinámica estocástica unidimensional sobrearmortiguada es:

$$\begin{aligned}\eta \dot{x} &= -V'(x(t), f(t)) + y(t) + F + \xi(t) \\ \langle \xi(t), \xi(s) \rangle &= 2\eta k_B T \delta(t - s)\end{aligned}$$

donde η es el coeficiente de fricción; $V'(x, f) = \frac{\partial V(x, f)}{\partial x}$ es un potencial periódico para $f(t)$, es decir, $V(x + L, f(t)) = V(x, f(t)) \quad \forall x, \forall t$; $\xi(t)$ representa las fluctuaciones termales modelado por ruido gaussiano blanco con media 0 e intensidad $2\eta k_B T$; F representa una fuerza de carga que no se considera parte del sistema pero se lo entiende como una perturbación externa para estudiar la respuesta del sistema a este estímulo; $f(t)$ e $y(t)$ son funciones o bien periódicas o bien estocásticas dependientes del tiempo.

Principalmente existen dos tipos de clases fundamentales de modelos de ratchets:

- si $y(t) \equiv 0$ se las conoce como ratchets pulsadas (en inglés *pulsating ratchets*).
- si $f(t) \equiv 0$ se las llama ratchets inclinadas (en inglés *tilting ratchets*).



Un caso particular de ratchets pulsadas es cuando $V(x, f(t))$ es de la forma $V(x) [1 + f(t)]$, conocidas como ratchets fluctuantes (*fluctuating potential ratchets*). Supuesto esto, si $f(t)$ sólo puede tomar dos posibles valores (tales como, por ejemplo, $+1$ y -1) se las conoce como ratchets encendidas-apagadas (*on-off ratchets*) [1, 35]. Estas últimas se utilizan principalmente para separar partículas y para diseñar artefactos que transportan ADN [13].

Pues bien, cuando $f(t) \equiv 0$, el potencial $V(x, f(t))$ queda sólo dependiendo del valor de x , es decir, $V(x, f(t)) = V(x)$. Además, si $y(t)$ es un proceso estocástico, se habla de fuerza fluctuante de ratchet (*fluctuating force ratchet*) [1, 35] y si $y(t)$ es un forzante periódico se la conoce como *rocking ratchet*, debido a que son sacudidas periódicamente [41].

Si $V(x)$ es un potencial simétrico, la simetría rota de $y(t)$ resulta ser suficiente y necesaria para obtener una corriente finita $\langle \dot{x} \rangle$. Cuando $y(t)$ no es simétrico, aún si $V(x)$ lo es o no, se las conoce como ratchets asimétricas inclinadas (*asymmetrically tilting ratchet*).

Otra clase de ratchets es cuando $f(t) \equiv 0$ y $y(t) \equiv 0$, pero en este caso la temperatura T depende del tiempo o del espacio. A este tipo de ratchets se los conoce como ratchets de Seebeck y ratchets de temperatura.

2.3. Ruido

En la conciencia colectiva de la población, al ruido siempre se lo asocia a cuestiones negativas, haciendo todo lo posible por eliminarlo o disminuirlo. Pero, a la hora estudiar modelos que describen las dinámicas de situaciones reales (ya sean físicas, biológicas, químicas, etc) hay que tener en cuenta que es imposible aislar completamente un sistema [35], y, en particular, que todo sistema de pequeña escala se ve afectado por fluctuaciones térmicas, generalmente de fuentes que no pueden ser controladas, por lo que el ruido siempre está presente en este tipo de situaciones.

Además, cuando los elementos estudiados son muy pequeños, como por ejemplo los motores brownianos, las fluctuaciones termales son significativas com-

paradas con la energía que mueve a los mismos [42]. Por lo que los motores que operan en escala microscópica (nanoscópica) tienen que tolerar su ambiente estocástico.[43]

Cabe señalar que la literatura reivindica la presencia del ruido en ciertos sistemas como ingredientes necesarios para que un determinado suceso ocurra. A saber:

1. Como se mencionó anteriormente: El estudio del movimiento de pequeñas partículas en un fluido y se mueven bajo la influencia de fuerzas aleatorias que son el resultado de las colisiones con las moléculas del fluido inducido por las fluctuaciones térmicas.[44]
2. Un ejemplo del efecto del ruido se observa en neuronas sensoriales. Estas son neuronas excitables que están en silencio en ausencia de ruido y disparan un spike de un potencial de acción en respuesta a un fuerte estímulo. Un estímulo débil mantiene a la neurona en silencio por lo que no transporta información acerca del estímulo. Con ruido presente, la neurona dispara codificando el estímulo en una secuencia de intervalos de spikes [45]. El origen del ruido puede ser interno (las neuronas pueden ser muy ruidosas) o externo (por ejemplo el ambiente) o una combinación de ambos. [46]
3. El Ruido puede representar una fuente de excitación del sistema tal como el impulso de las moléculas en un gas diluido. [1]
4. Las fluctuaciones termales en los motores proteicos son necesarias para lograr que la molécula esté en un estado de transición para alcanzar rápidamente niveles de alta energía.[47]
5. Una señal se puede amplificar y optimizar mediante el ruido, o bien, con la ayuda de una cantidad óptima de ruido es posible detectar la periodicidad de una señal que no supera cierta barrera de potencial (Resonancia Estocástica). [48]



2.3.1. Resonancia estocástica

Ahora bien, si no es posible eliminarlo, ¿se lo podrá utilizar en beneficio del transporte? Diferentes trabajos indican que si. Un ejemplo en el cual la presencia de ruido mejora la respuesta de un sistema ante una señal externa es lo que se conoce como Resonancia Estocástica (de ahora en más **RE**). Es decir, la RE es el fenómeno por el cual el ruido provoca en un realce de una señal[45, 49, 46].

La RE es comunmente ejemplificada de la siguiente manera: consideremos una partícula sobreamortiguada de masa m , cuya posición está representada por $x(t)$ y está afectada por un potencial de doble pozo de la forma

$$V(x) = V_0 \left(\frac{bx^4}{4} - \frac{ax^2}{2} \right)$$

con $a, b > 0$ (representada en la figura 2.5).

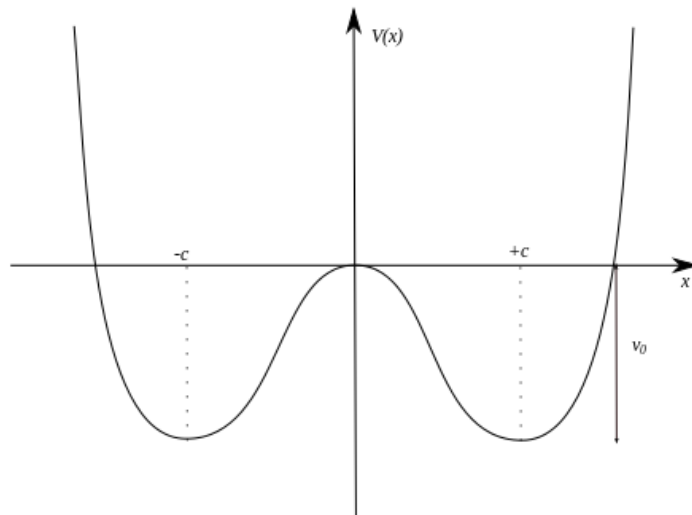


Figura 2.5: Potencial de doble pozo, con mínimos en $+c$ y $-c$ con $c = \sqrt{a/b}$. Los mínimos están separados por una barrera de potencial de altura V_0 .

En el sistema determinista, la partícula se relajaría en uno de los pozos. Si se considera que el sistema es afectado por un forzante externo de la forma

$$F^{ext}(t) = V_1 \cos(\omega t)$$

con $V_1 < V_0$, este forzante no genera transiciones entre los dos pozos, es decir, la partícula permanece en el mínimo inicial y no salta de un pozo al otro. Ahora bien, si el sistema está inmerso en un baño térmico, la partícula recibiría aleatoriamente golpes que permitirían que la partícula salte hacia el otro pozo, superando la barrera del potencial en $x = 0$. Al inspeccionar la Figura 2.6, se puede observar que cuando el ruido es bajo, la partícula permanece más tiempo en uno de los pozos y las transiciones se producen de manera aleatoria; a una intensidad ideal de ruido, las transiciones entre mínimos coinciden con el período del forzante; y si el ruido es alto, se pierde el efecto cooperativo entre éste y el forzante externo.

En la figura 2.7, se muestra las transiciones entre ambos mínimos a un nivel óptimo de ruido.

Debido a esto, a la RE se la suele tomar como un fenómeno de barrera puesto que si, por ejemplo, la señal es lo suficientemente débil para no superar cierta barrera para transmitir la información, el ruido puede intensificar la señal y que ésta logre superar esa barrera. Sin embargo, una poca cantidad de ruido no necesariamente desencadena este fenómeno pero una cantidad excesiva destruye la señal [38].

El fenómeno de RE es posible encontrarlo en sistemas biológicos, magnéticos, físicos, etc [50]. Por ejemplo, la RE se observa en la periodicidad de las eras de hielo de la Tierra:

Suponiendo que el clima de la Tierra tiene dos estados (uno a bajas temperaturas equivalente a la era del hielo y otro a altas temperaturas), los eventos geodiámicos (por ejemplo, cambios en la órbita terrestre) producen fluctuaciones que pueden causar las transiciones entre ambos estados. Si estas fluctuaciones son pequeñas, los cambios de estado serían muy poco frecuentes; pero si son muy grandes, los cambios serían extremadamente frecuentes. Entonces, la RE aparece en el nivel óptimo de fluctuaciones. En diferentes trabajos [51, 52, 53], los autores encontraron que la fuerza periódica externa (por ejemplo, la radiación solar) no alcanzaba para generar un cambio de estado pero tampoco lo hacía la fuerza estocástica interna (desbalances en el intercambio de energía, circulación atmosférica u oceánica). Sin embargo, la combinación de ambos fenómenos amplifica la fuerza externa causando el cambio de estado.

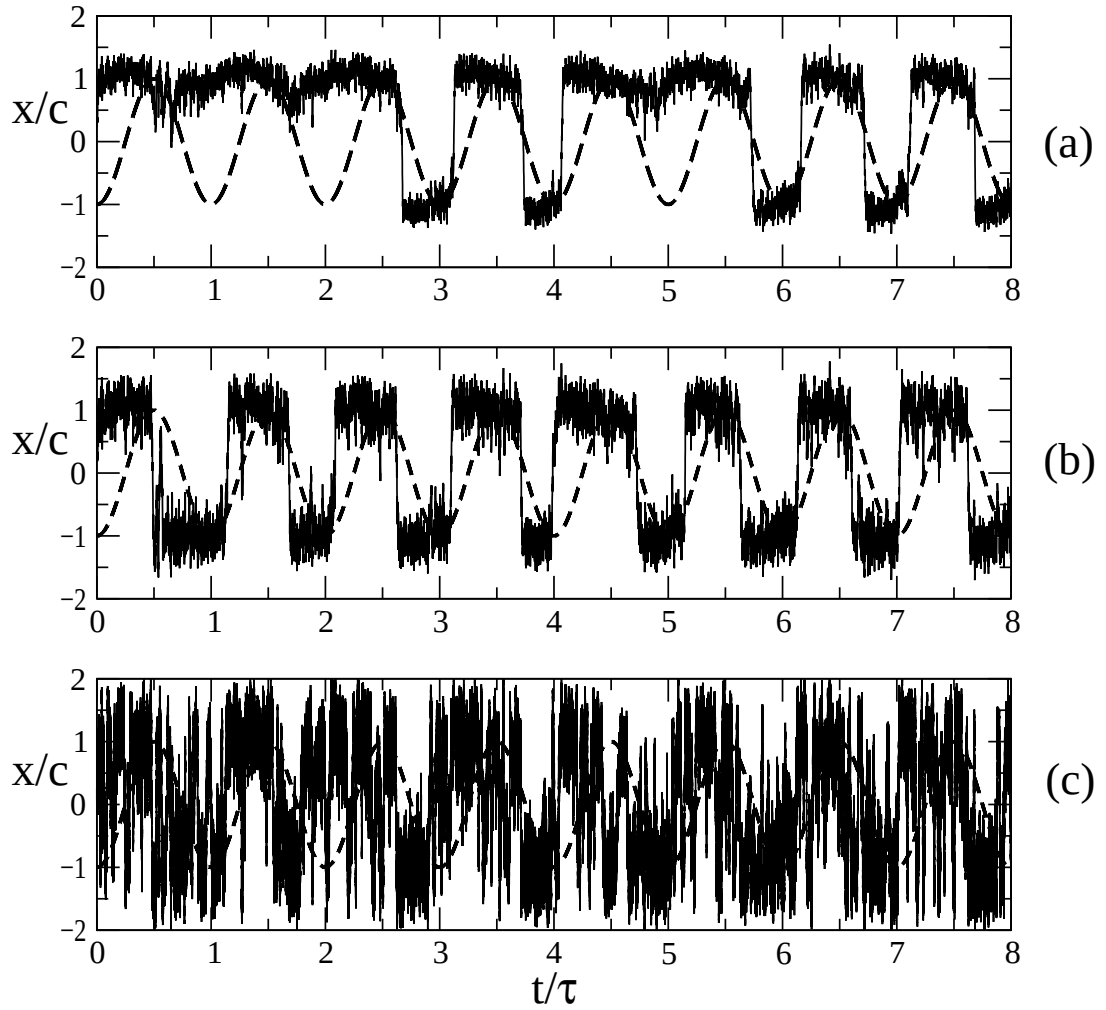


Figura 2.6: Forzante externo (en línea punteada) y la órbita ruidosa de una partícula para diferentes intensidades de ruido: *a*) Cuando la intensidad del ruido es baja, las transiciones entre ambos mínimos son pocas por lo que la partícula permanece más tiempo en alguno de ellos; *b*) Para una intensidad de ruido óptima, la transición entre mínimos está sincronizada con el forzante externo; *c*) si la intensidad del ruido es alta, las transiciones son demasiadas perdiéndose la sincronización con el forzante externo.

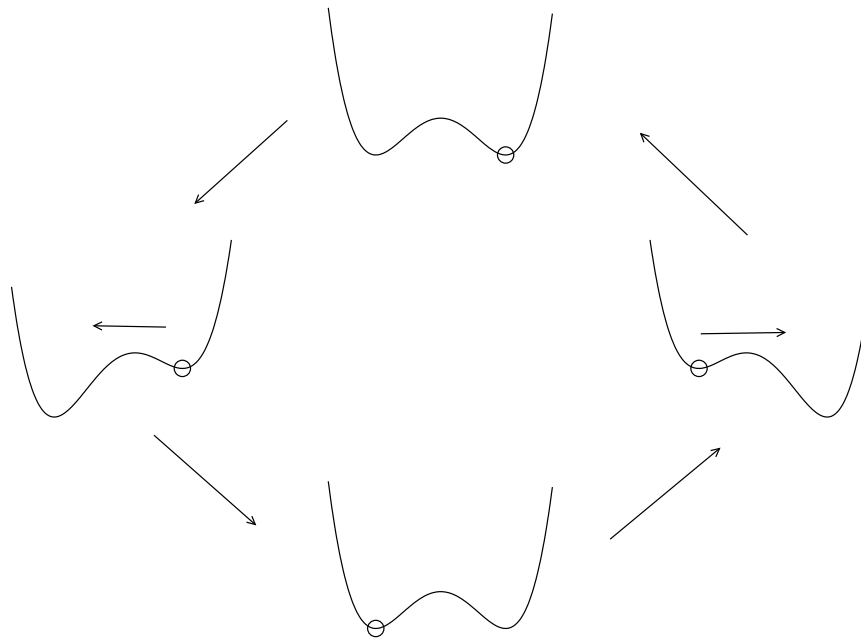


Figura 2.7: Secuencia del efecto cooperativo del forzante externo y de un nivel adecuado de ruido sobre el potencial $V(x)$.

Una posible vinculación entre la RE y las ratchets es su capacidad de extraer trabajo útil de ambientes fluctuantes. Esto surge del hecho que las ratchets pueden producir una corriente sin una fuerza externa sólo usando fluctuaciones de no equilibrio. [38]

2.3.2. Ruido Blanco

Teniendo en cuenta que prácticamente es imposible conocer con precisión las posiciones y las velocidades de las partículas para todo tiempo t , no es posible conocer con certeza la acción del ruido sobre ellas. Por ese motivo, se lo puede considerar como una fuerza que es la conjunción de infinitas contribuciones y de esa manera se la puede estudiar probabilísticamente.



Recordando el Teorema Central del Límite ⁴, para poder aproximar una variable aleatoria X mediante una distribución normal (gaussiana) es necesario conocer su media y su varianza (o en su defecto, la correlación entre los valores de X).

Ahora bien, teniendo en cuenta lo planteado en la sección 2.1, la variable $\xi(t)$ representa el ruido y como éste no favorece ninguna dirección en particular, su valor medio debe valor cero

$$\langle \xi(t) \rangle = 0$$

Por otro lado, teniendo en cuenta la invarianza temporal, la correlación entre los valores de la fuerza en dos tiempos debe depender de la diferencia entre ellos, es decir,

$$\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = \text{Cor}(t_2 - t_1).$$

No obstante, a esta función de correlación del ruido se la puede aproximar como un decaimiento exponencial con respecto a τ_0 (tiempo característico de una colisión)

$$\text{Cor}(t_2 - t_1) = \frac{B}{\tau_0} e^{-\frac{t_2 - t_1}{\tau_0}}$$

siendo B la intensidad del ruido.

Dado que el tiempo de observación de una partícula Browniana es mucho más grande que τ_0 y haciendo la asunción que $\tau_0 \rightarrow 0$, se obtiene que la función de correlación termina resultado una Delta de Dirac:

$$\text{Cor}(t_2 - t_1) = B\delta(t_2 - t_1).$$

Con esta definición, a ξ se lo llama Ruido Blanco y el coeficiente B es equivalente a $2\eta k_B T$, siendo η el coeficiente de fricción, k_B la constante de Boltzmann

⁴Sean $X_1, \dots, X_n$ variables aleatorias independientes idénticamente distribuidas con media $E(X_i) = \mu$ y varianza $V(X_i) = \sigma^2 \forall i$. Sea $\bar{X} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i$, entonces

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} P\left(\frac{\bar{X} - \mu}{\frac{\sigma}{\sqrt{n}}} \leq z\right) = \phi(z)$$

donde ϕ es la función de distribución acumulada de la distribución normal con media 0 y varianza 1.

y T la temperatura del baño térmico. Bajo estas condiciones, a $\xi(t)$ se lo define como un proceso gaussiano estacionario.

El nombre de ruido blanco hace referencia a que la fuerza estocástica no tiene una escala temporal característica tal como la luz blanca no tiene una frecuencia característica (esta luz contiene todas las frecuencias del espectro visible uniformemente distribuidas).

Otra manera de analizar el ruido Blanco es mediante un proceso de Wiener. Este estudio se encuentra en el Anexo B.

2.4. Modelo de Frenkel-Kontorowa

El punto de partida para este trabajo de tesis se basa en el modelo propuesto en la década del 30 por Y. Frenkel y T. Kontorowa. Estos investigadores desarrollaron un sencillo modelo que describe la evolución de un sistema constituido por una cadena de partículas que interactúan con sus vecinos más cercanos afectados por un potencial externo periódico [19], usualmente representado como en la figura 2.8 .

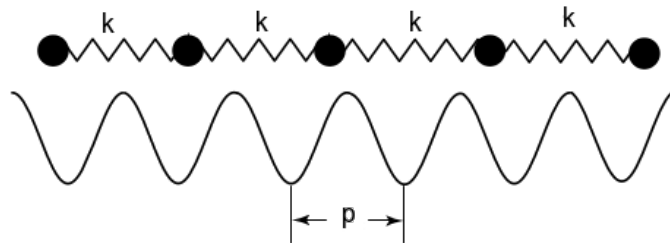


Figura 2.8: Representación típica del modelo de Frenkel-Kontorova: Una cadena de partículas que interactúan a través de resortes armónicos de constante elástica k en presencia de un potencial externo de periodo p .

El modelo de Frenkel-Kontorowa (F-K) es ampliamente utilizado para describir diferentes fenómenos tales como:

- Dinámica de Dislocación (Kink): Este modelo fue uno de los primeros mo-



delos que permitió explicar la dinámica de una discolación a nivel atómico en sólidos. Éstas dislocaciones definen la mayoría de las propiedades mecánicas en los sólidos.[20]

Problemas de Crowdion: El Crowdion es una configuración especial de los intersticiales (espacios vacíos entre espacios llenos) a baja temperatura en metales (de configuración cúbica centrada o bien en las caras o bien en el centro). Básicamente, el problema surge cuando hay un átomo extra insertado en una fila de átomos en un metal con una estructura cristalina ideal. Usualmente, debido al potencial cristalino, los átomos sólo pueden moverse en una única dirección por lo que la dinámica de los átomos de la fila puede describirse fácilmente mediante el modelo F-K.

- Dinámica del ADN: si bien la estructura del ADN es compleja por ser una doble cadena en forma de hélice, se la puede modelar asumiendo que todas las bases de las cadenas son idénticas. Estableciendo una analogía entre el movimiento rotacional de las bases de las cadenas y los movimientos rotacionales de los péndulos se puede notar que uno de los estados del ADN se puede modelar mediante la solución Kink del modelo de Frenkel-Kontorowa. [20, 54]
- Unión de Arreglos de Josephson: Estos arreglos son dispositivos eléctricos en el que dos metales superconductores están separados por una capa fina de aislante, mediante la cual una corriente eléctrica puede circular sin la necesidad de una diferencia de potencial. El modelo de F-K permite modelar el flujo de una cadena discreta de partículas efectivas en este tipo de arreglos acoplados.[20, 55, 56, 57]
- Superficies de Átomos Absorbidos: este modelo se lo utiliza para describir la dinámica de átomos y las capas de átomos absorbidos en las superficies de los cristales. Para este caso, el potencial F-K del sistema se define por los átomos absorbidos en la superficie del cristal, mientras que los átomos absorbidos en la superficie son modelados como partículas efectivas F-K.[20]

Para encontrar una ecuación que describa el modelo de F-K se parte del La-

grangiano del mismo. Éste viene dado por

$$\mathcal{L} = \mathcal{K} - \mathcal{U}$$

donde

► $\mathcal{K}$ es la Energía Cinética dada por

$$\mathcal{K} = \frac{m}{2} \sum_n \left(\frac{dx_n}{dt} \right)^2$$

donde m es la masa de la partícula y x_n es la posición de la n -ésima partícula de la cadena.

► $\mathcal{U}$ es la Energía Potencial compuesta por

$$\mathcal{U} = \mathcal{U}_{sub} + \mathcal{U}_{int}$$

* $\mathcal{U}_{sub}$ representa la interacción de la cadena con el potencial externo periódico, de periodo p

$$\mathcal{U}_{sub} = \sum_n V_{sub}(x_n).$$

* $\mathcal{U}_{int}$ representa la interacción a primeros vecinos de las partículas

$$\mathcal{U}_{int} = \sum_n V_{int}(x_{n+1} - x_n).$$

En particular, si a V_{int} se lo expande en la serie de Taylor y sólo se considera la interacción armónica, queda que $V_{int} \approx \frac{k}{2}(x_{n+1} - x_n)^2$ y V_{int}'' representa la constante del resorte.

De este modo, el lagrangiano para la n -ésima partícula viene dado por

$$\mathcal{L}_n = \frac{m}{2} \left(\frac{dx_n}{dt} \right)^2 - V_{sub}(x_n) - \frac{k}{2}(x_{n+1} - x_n)^2 + \frac{k}{2}(x_n - x_{n-1})^2$$

Con lo que la ecuación de movimiento para la n -ésima partícula la obtenemos, como es usual, haciendo:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{x}_n} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x_n} = 0$$



Por lo que la ecuación de movimiento queda

$$0 = m \frac{d^2 x_n}{dt^2} + V'_{sub}(x_n) - k(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) \quad (2.10)$$

Teniendo en cuenta la ecuación anterior, si las partículas están en presencia de fricción viscosa, $F_n^{fr} = -m\eta \dot{x}_n(t)$ (donde η representa el coeficiente de fricción) y de una fuerza estocástica aditiva $\xi_n(t)$, la ecuación de F-K queda

$$m \frac{d^2 x_n}{dt^2} - m\eta \dot{x}_n(t) - k(x_{n+1} + x_{n-1} - 2x_n) + V'_{sub}(x_n) = \xi_n(t) \quad (2.11)$$

Resultando ser (2.11) una ecuación de Langevin.

Capítulo 3

Modelo

Como se dijo anteriormente, el sistema estudiado en este trabajo está inspirado en el modelo de Frenkel-Kontorowa. El modelo utilizado fue introducido por Fendrik, et. al. en [22, 58, 59], el mismo consiste en un sistema compuesto por N partículas en que interactúan entre sí, a primeros vecinos, mediante un potencial armónico V^{osc} , dispuestas en un anillo unidimensional de longitud L sujetas a un potencial periódico V_α y que son impulsadas por una fuerza externa F^{ext} en un regimen sobreamortiguado.

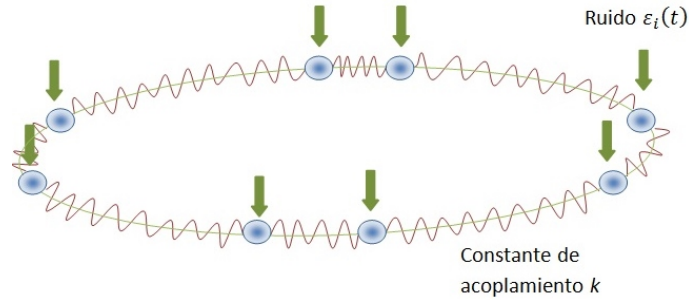


Figura 3.1: Las partículas se ubican a lo largo de un anillo de longitud L . Las mismas interactúan mediante un potencial armónico V^{osc} a primeros vecinos y cada una está afectada por una fuente de ruido térmico $\zeta_i(t)$.

La evolución de la i -ésima partícula está dada por la siguiente ecuación:



$$\eta \dot{x}_i(t) + \frac{\partial V_\alpha(x_i)}{\partial x_i} + \frac{\partial V^{osc}(x_{i-1}, x_i, x_{i+1})}{\partial x_i} = F^{ext}(x_i, t) + \varsigma \xi_i(t) \quad (3.1)$$

donde:

- $x_i(t)$ representa la posición de la partícula i , $i = 1, 2, \dots, N$ con la convención $x_{N+1} = x_1$ y $x_0 = x_N$. Están medidos en sentido horario a lo largo de un anillo de longitud L , por lo que verifica la condición periódica $x_i + L = x_i$.
- η es el coeficiente de amortiguamiento.
- ς es igual a $\sqrt{2k_B T}$, con k_B es la constante de Boltzmann y T representa la temperatura del baño térmico en la que se encuentra el sistema.

3.1. Potencial de Ratchet

El potencial de Ratchet $V_\alpha(x)$ es un potencial unidimensional, periódico y con una asimetría derecha-izquierda dada por:

$$V_\alpha(x) = \begin{cases} V_o \left(\cos \left[\frac{\pi}{\alpha} \left(\frac{(\alpha+1)x}{d} \right) \right] \right), & \text{para } 0 \leq \frac{x}{d} \leq \frac{\alpha}{(\alpha+1)} \\ -V_o \left(\cos \left[\pi \left((\alpha+1) \frac{x}{d} - \alpha \right) \right] \right), & \text{para } \frac{\alpha}{(\alpha+1)} \leq \frac{x}{d} \leq 1 \end{cases} \quad (3.2)$$

con la condición periódica $V_\alpha(x+d) = V_\alpha(x)$ fuera del intervalo $(0, d)$. De este modo, la longitud total del anillo está dada por $L = sd$, donde s es el número (par) de mínimos y d es la distancia lineal entre mínimos consecutivos del ratchet.

El parámetro α ($\alpha > 0$) controla la asimetría derecha-izquierda. Para $\alpha > 1$, el mínimo de la ratchet está desplazado en sentido horario (ver figura 3.2 a).; para $\alpha < 1$, el mínimo está desplazado en sentido contrario (ver figura 3.2 b)).

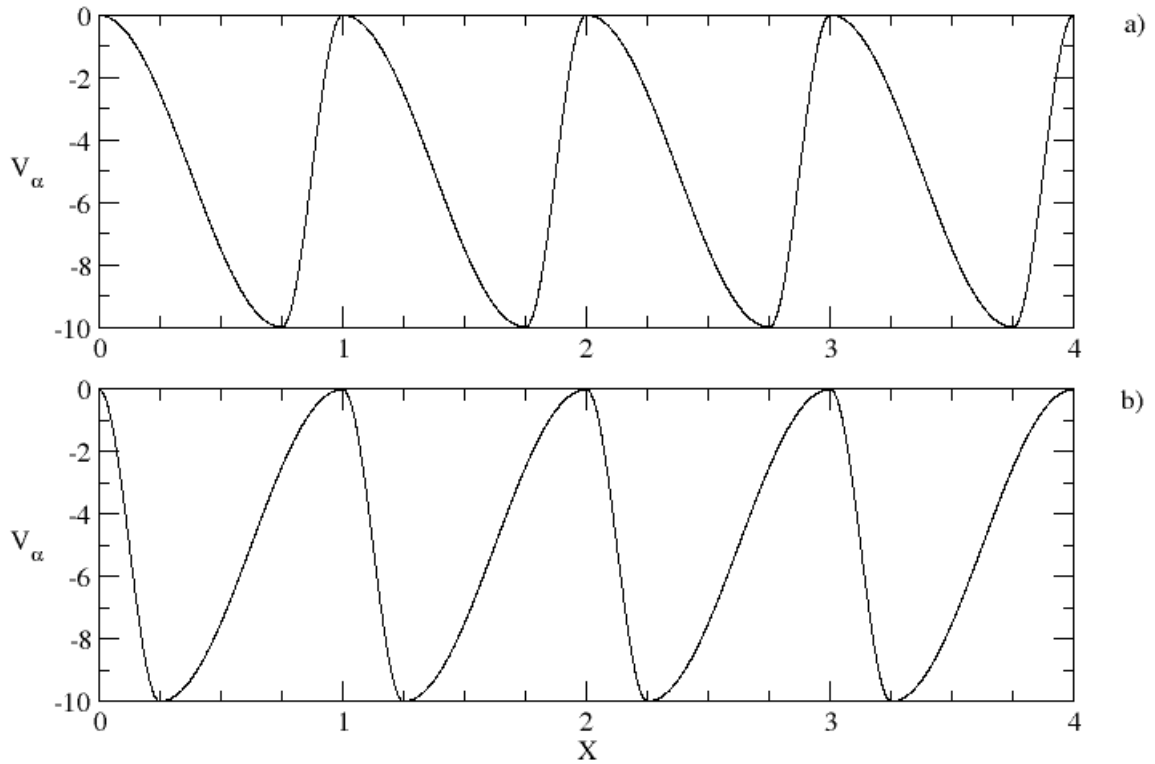


Figura 3.2: Potencial de Ratchet V_α vs. X (posición en el anillo) para a) $\alpha = 3$ y b) $\alpha = \frac{1}{3}$.

3.2. Forzante Externo

Para este trabajo, se consideró un forzante externo $F^{ext}(x_i, t)$ cuyo gradiente depende del tiempo y su periodicidad espacial es el doble de V_α

$$F^{ext}(x_i, t) = -\varepsilon \frac{\partial V^{ext}(x_i, t)}{\partial x_i} = -\varepsilon \sin(\omega t) \frac{\partial \sin(\pi x_i/d)}{\partial x_i} \quad (3.3)$$

donde ε es la amplitud del forzante y ω es su frecuencia. De esta manera, los mínimos alternan en el tiempo como mínimo absoluto y están en fases opuestas (ver figura 3.3). Por ello el número de mínimos del ratchet debe ser par.

Cabe señalar que, en el regimen sobreamotiguado, si sólo se aplica en las partículas la fuerza dada por la ecuación 3.3 (esto es sin la fuerza dada por el potencial de ratchet y sin las interacciones entre ellas), las partículas oscilarán alrededor de su posición inicial.

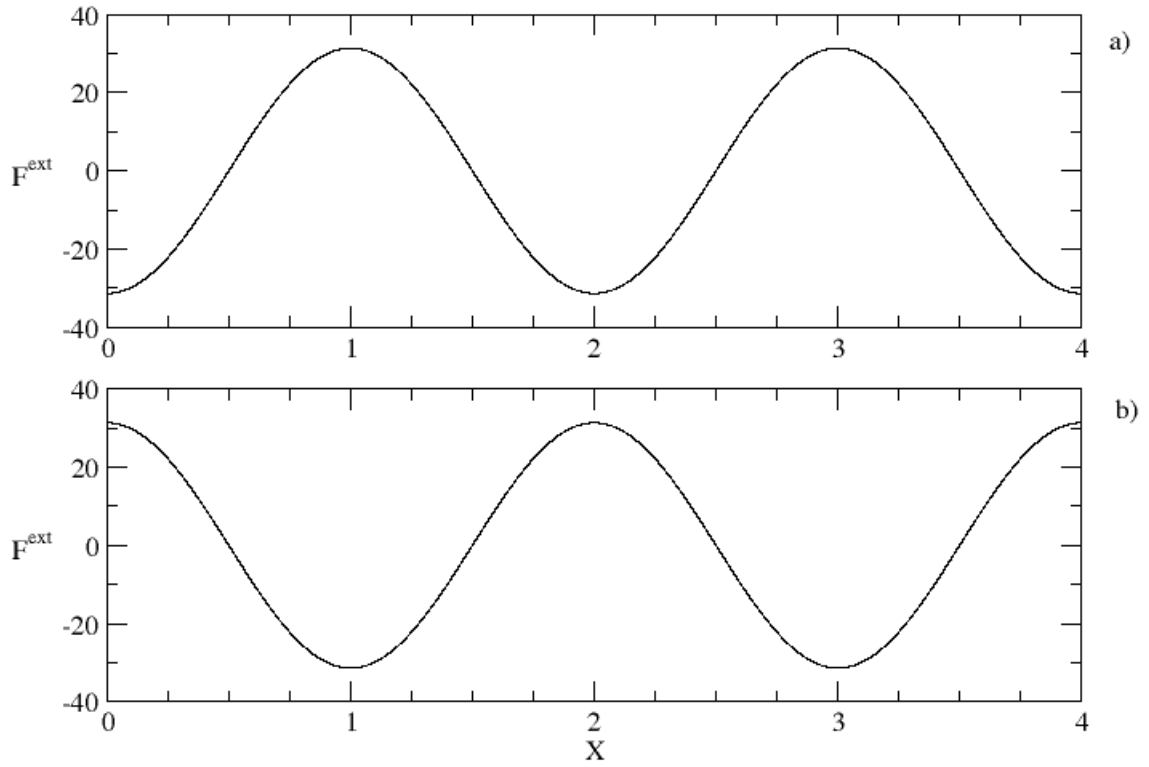


Figura 3.3: F^{ext} vs. X (posición en el anillo) para $\varepsilon = 10$ y a) $t = \frac{\tau}{4}$ y b) $t = \frac{3\tau}{4}$ con $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$.

Por lo que si se tiene en cuenta el potencial total dado por la suma $V_{\alpha}(x)$ y $V^{ext}(x)$, este produce que los mínimos consecutivos del ratchet alternen como mínimos absolutos. Para notar el efecto observar la figura 3.4.

3.3. Potencial de interacción

La interacción entre partículas brownianas genera una variedad de efectos colectivos. El comportamiento colectivo de las partículas acopladas elásticamente bajo ciertas condiciones lleva a la velocidad v sea mayor a que la de una sola partícula [60, 61]. Y si se considera además que la velocidad depende de la constante de acoplamiento [62] se llega a que es posible controlar la intensidad y la dirección del movimiento teniendo en cuenta la interacción entre las partículas [63].

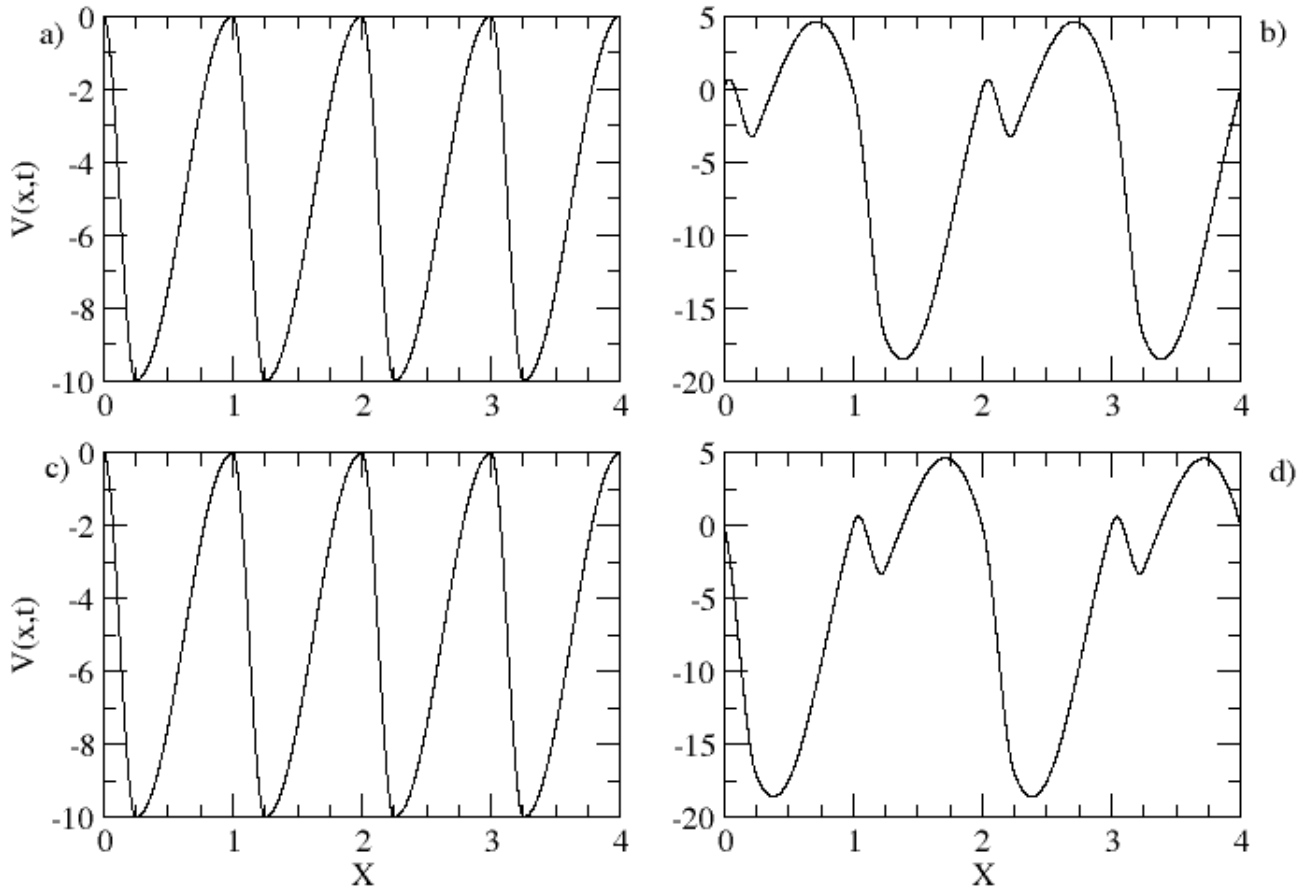


Figura 3.4: Potencial total $V(x, t) = V_\alpha(x) + V^{ext}(x, t)$ para a) $t = 0$, b) $t = \frac{\tau}{4}$, c) $t = \frac{\tau}{2}$ y d) $t = \frac{3\tau}{4}$ con $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$.

Debido a lo anterior, para este sistema se optó por trabajar con partículas interactuantes y que el potencial de interacción sea el utilizado en el modelo de Frenkel-Kontorowa dado por:

$$V^{osc}(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}) = \frac{1}{2}k[(x_{i-1} - x_i)^2 + (x_i - x_{i+1})^2]. \quad (3.4)$$

En este caso, debido a que el anillo es unidimensional, las partículas no se pueden interpenetrar, es decir, en todo momento se mantiene el orden relativo entre ellas. En otras palabras, una vez posicionadas en el anillo, detrás de la partícula 1, se encuentra la número 2, luego la 3, y así sucesivamente hasta llegar a la partícula N . Luego de la partícula N , se encuentra la partícula 1. Por lo que,



teniendo en cuenta esto, se debe considerar la inclusión de un potencial de interacción del tipo *carozo duro* que impide la interpenetración. Para mayores detalles ver el Apéndice C.

3.4. Ruido Térmico

El término $\zeta \xi_i(t)$ de la ecuación (3.1) representa la fuente de ruido blanco Gaussiano que satisface la condición

$$\langle \xi_i(t) \xi_i(t') \rangle = \delta(t - t').$$

El factor ζ es igual a $\sqrt{2k_B T}$, donde k_B es la constante de Boltzmann, por lo que ese término corresponde a un baño térmico de temperatura T .

3.5. Constantes Adimensionales

La evolución de la dinámica del sistema está dada por la siguiente ecuación:

$$m\ddot{x}_i(t) + \eta\dot{x}_i(t) + \frac{V_o}{d}f(x_i/d) + k[(x_i - x_{i-1}) + (x_i - x_{i+1})] = \frac{\varepsilon}{d}g(x/d, \omega t) + \sqrt{2\eta k_B T} \xi_i(t), \quad (3.5)$$

donde $f(x_i/d)$ representa la dependencia de las coordenadas de la fuerza del ratchet, $g(x/d, \omega t)$ representa la dependencia de las coordenadas y del tiempo de la fuerza externa y $\langle \xi_i(t) \xi_i(t') \rangle = \delta(t - t')$.

Esta ecuación depende de 7 parámetros: masa (m), el coeficiente de amortiguamiento (η), la amplitud del Potencial de Ratchet $2V_o$, la distancia lineal entre dos mínimos del potencia del ratchet (d), la amplitud del forzante externo (ε), el periodo del forzante externo ($\tau = 2\pi/\omega$), la constante elástica (k) y la magnitud del ruido blanco ($\sqrt{2\eta k_B T}$).

Hay tres dimensiones independientes: longitud, tiempo y energía. Se toma a d como unidad de longitud, a τ como unidad de tiempo y a $2V_o$ como unidad de energía. De esta manera, se definen cinco parámetros adimensionales:

$$\begin{aligned}\Pi_m &= \frac{md^2}{2V_o\tau^2} \\ \Pi_\eta &= \frac{\eta d^2}{2V_o\tau} \\ \Pi_\varepsilon &= \frac{\varepsilon}{2V_o} \\ \Pi_k &= \frac{kd^2s^2}{2V_oN^2} \\ \Pi_T &= \frac{k_B T}{2V_o}\end{aligned}$$

y al reemplazar los parámetros en la ecuación 3.5 se obtiene:

$$\Pi_m \ddot{x}_i(t) + \Pi_\eta \dot{x}_i(t) + (1/2)f(x) + \Pi_k(N/s)^2[(x_i - x_{i-1}) + (x_i - x_{i+1})] = \Pi_\varepsilon g(x, t) + \sqrt{2}\sqrt{\Pi_\eta}\sqrt{\Pi_T}\xi_i(t) \quad (3.6)$$

donde las posiciones están medidas en unidades de d y el tiempo está medido en unidades de τ . Para dinámicas sobreamortiguadas $\Pi_m \ll \Pi_\eta$, esto es $m \ll \eta\tau$, se descarta el término inercial. Para este estudio, se fija $\Pi_\eta = 1$ asumiendo una dinámica sobreamortiguada.

Coloquialmente, las cantidades adimensionales representan:

- Π_m es una medida que compara la energía cinética de la partícula con la profundidad del potencial de ratchet.
- Π_η compara el promedio de energía disipada por la fuerza de amortiguación con la profundidad del potencial de ratchet.
- Π_ε compara la energía provista por el forzante externo con la profundidad del potencial de ratchet $2V_o$.
- Π_k que es una medida del potencial elástico promedio en unidades de la profundidad del potencial de ratchet.
- Π_T compara la energía entregada por el baño térmico con la profundidad del potencial de ratchet.



La falta de soluciones analíticas nos lleva a estudiar el modelo mediante simulaciones numéricas.

Capítulo 4

Las Posibles Corrientes

En este capítulo, se mostrará cómo la restricción de continuidad, es decir la conservación de la cantidad de partículas, y las simetrías en el tiempo y en el espacio de los potenciales caracterizan las posibles corrientes estacionarias .

La velocidad se define como:

$$\bar{v} = s \lim_{n_o \rightarrow \infty} \frac{n_w(n_o)}{n_o}, \quad (4.1)$$

donde s es el número de sitios y $n_w(n_o)$ es el número de vueltas alrededor del anillo luego de n_o oscilaciones del forzante externo $F^{ext}(x_i, t)$.

La corriente se define por:

$$\bar{j} = \bar{v}\rho, \quad (4.2)$$

donde N es el número de partículas y $\rho = N/s$ es la densidad de partículas, es decir, indica cuantas partículas hay por sitio.

Aquí analizaremos las posibles corrientes en dos casos: cuando la densidad de partículas es entera (en esa situación se dirá que el sistema es perfecto) y cuando el sistema tiene un defecto. En este trabajo, diremos que un sistema es defectuoso cuando en $s - 1$ sitios haya la misma cantidad de partículas y en un único sitio haya sólo una partícula extra. Es decir, $N = (s \times l) + 1$, donde l es entero y, de esta manera, ρ no es entero.



4.1. Densidad Entera

Para simplificar la descripción, imaginemos que el pozo del potencial de ratchet es lo suficientemente profundo para que las partículas estén en el fondo del potencial, es decir en los sitios, y la dinámica se reduce a la transición entre “estados”, esto es, a contar cuantas partículas hay en cada sitio .

El potencial de Ratchet es invariante bajo traslación en el doble de la distancia entre sitios y el potencial externo también lo es bajo la traslación de un periodo en el tiempo.

Para distinguir y clasificar la dinámica, observando al sistema en cada mitad de periodo en el momento exacto en el cual el potencial total dado por

$$V(x, t) = V_{\alpha}(x) + V^{ext}(x, t)$$

presenta dos mínimos relativos consecutivos distintos (Ver figura 3.4 *b* y *d*). Y, teniendo en cuenta argumentos de simetría, se puede decir que una posible distribución de partículas será

$$n, m, n, m, n, m, \dots, n, m.$$

De esto último se deduce que, asumiendo que la cantidad de sitios s es par, en la mitad de los sitios hay n partículas y en el resto hay m partículas.

$$\begin{aligned} \frac{s}{2}n + \frac{s}{2}m &= s \cdot \rho \\ n + m &= 2\rho \end{aligned}$$

En la siguiente mitad del periodo, la distribución de partículas será

$$n', m', n', m', n', m', \dots, n', m'.$$

con $n' + m' = 2\rho$.

Para determinar las corrientes se puede decir que, como consecuencia de asumir sobreamortiguación, en cada medio periodo las partículas migrarán desde los sitios en los cuales el potencial externo es máximo a los sitios donde el potencial es mínimo (esto no sería así si la inercia tuviese mayor importancia). De esta

manera, si una cantidad r de las $n - n'$ partículas del sitio i que migran lo hacen al sitio $i - 1$ y el resto, $n - n' - r$, lo hacen al sitio $i + 1$, el flujo en $\frac{s}{2}$ sitios será:

$$\begin{aligned}\phi_i &= (n - n' - r) - r \\ \phi_i &= n - n' - 2r\end{aligned}$$

con $r \leq n - n'$. Por otro lado, si una cantidad r' de las $m - m'$ partículas del sitio j que migran lo hacen hacia el sitio $j - 1$ y el resto, $m - m' - r'$, lo hacen hacia el sitio $j + 1$, el flujo en los $\frac{s}{2}$ sitios restantes será:

$$\begin{aligned}\phi_j &= (m - m' - r') - r' \\ \phi_j &= m - m' - 2r'\end{aligned}$$

donde $r' \leq m - m'$.

Por lo que el flujo neto total de las partículas ϕ_p .

$$\begin{aligned}\phi_p &= \frac{\frac{s}{2}(n - n' - 2r) + \frac{s}{2}(m - m' - 2r')}{s} \\ \phi_p &= \frac{\frac{s}{2}(n - n' - 2r + m - m' - 2r')}{s} \\ \phi_p &= \frac{1}{2}(n + m - (n' + m') - 2(r + r'))\end{aligned}$$

como $n + m = n' + m'$,

$$\phi_p = -(r + r')$$

Para determinar los posibles valores de ϕ_p , si se considera el caso extremo en el que $n = 2\rho$, $m = 0$, $n' = 0$ y $m' = 2\rho$, quedando $n - n' = 2\rho$ y $m - m' = -2\rho$, por lo que $0 \leq r \leq 2\rho$ y $-2\rho \leq r' \leq 0$, quedando así $-2\rho \leq -(r + r') \leq 2\rho$. Finalmente, $-2\rho \leq \phi_p \leq 2\rho$.

Para ejemplificar esto, consideremos el sistema en donde cantidad de sitios es 4 y hay 20 partículas, es decir, $\rho = 5$. En este caso

$$\begin{aligned}-2\rho &\leq \phi_p \leq 2\rho \\ -10 &\leq \phi_p \leq 10\end{aligned}$$



Por lo que los posibles valores de $\bar{j}$ son $-10, -9, -8, \dots, -1, 0, 1, \dots, 8, 9, 10$ y de esta manera las posibles velocidades son:

$\bar{j}$	$\bar{v} = \bar{j} \frac{s}{N}$	$\bar{j}$	$\bar{v} = \bar{j} \frac{s}{N}$
-10	-2	1	0.2
-9	-1.8	2	0.4
-8	-1.6	3	0.6
-7	-1.4	4	0.8
-6	-1.2	5	1
-5	-1	6	1.2
-4	-0.8	7	1.4
-3	-0.6	8	1.6
-2	-0.4	9	1.8
-1	-0.2	10	2
0	0		

4.2. Densidad No Entera

Ahora bien, si trabajamos con un sistema defectuoso, es decir con un sistema que tiene una partícula extra en un único sitio, podemos tener dos situaciones: que el defecto migre o no .

Para analizar esto suponemos una situación similar al caso anterior: observando al sistema cada medio periodo, justo cuando el potencial total presenta dos mínimos locales sucesivos distintos. Teniendo en cuenta argumentos de simetría, para este sistema una posible distribución de partículas sería

$$n, m, n + 1, m, n, m, \dots, n, m.$$

Por lo que en el siguiente medio periodo habrá dos posibilidades:

1. Si el defecto permanece en el sitio:

$$n', m', n' + 1, m', n', m', \dots, n', m'.$$

2. Si el defecto migra:

$$n', m' + 1, n', m', n', m', \dots, n', m' \text{ o } n', m', n', m' + 1, n', m', \dots, n', m'.$$

En el caso de que el defecto no migre, el análisis es idéntico al caso de ρ entero donde $-2 \left(\frac{N-1}{s} \right) \leq \phi_p \leq 2 \left(\frac{N-1}{s} \right)$ con N la cantidad total de partículas.

Para el caso de que el defecto migre, el flujo será:

- para $\frac{s}{2} - 1$ sitios, si una cantidad r de las $n - n'$ partículas del sitio i que migran lo hacen al sitio $i - 1$ y el resto, $n - n' - r$, lo hacen al sitio $i + 1$, el flujo es

$$(n - n' - r) - r = n - n' - 2r$$

- para $\frac{s}{2}$ sitios, si una cantidad r' de las $m - m'$ partículas del sitio j que migran lo hacen hacia el sitio $j - 1$ y el resto, $m - m' - r'$, lo hacen hacia el sitio $j + 1$, el flujo es

$$(m - m' - r') - r' = m - m' - 2r'$$

- para el sitio restante, cuando el defecto migre hacia el sitio siguiente (+1) o bien hacia el sitio anterior (-1)

$$(n - n' - (r \pm 1)) - (r \pm 1) = n - n' - 2(r \pm 1)$$

De esta manera, el flujo total del sistema será

$$\begin{aligned} \phi_p &= \frac{\left(\frac{s}{2} - 1\right)(n - n' - 2r) + \frac{s}{2}(m - m' - 2r') + (n - n' - 2(r \pm 1))}{s} \\ \phi_p &= \frac{\frac{s}{2}(n - n' - 2r) + \frac{s}{2}(m - m' - 2r') \pm 2}{s} \\ \phi_p &= \frac{\frac{s}{2}(n + m - (n' + m') - 2(r + r'))}{s} \pm \frac{2}{s} \end{aligned}$$

como $n + m = n' + m'$,

$$\phi_p = -(r + r') \pm \frac{2}{s}$$

Por lo que $-2 \left(\frac{N-1}{s} \right) - \frac{2}{s} \leq \phi_p \leq 2 \left(\frac{N-1}{s} \right) + \frac{2}{s}$.



Por ejemplo, si se toma $s = 4$ y $N = 20 + 1$ partículas, se tiene que la densidad ρ no es entera (en este caso $\rho = \frac{21}{4} = 5.25$). De esta manera las posibles velocidades son:

- Si el defecto no migra

$\bar{j}_c$	$\bar{v} = \bar{j}_c \frac{s}{N}$	$\bar{j}_c$	$\bar{v} = \bar{j}_c \frac{s}{N}$
-10	$-\frac{40}{21}$	1	$\frac{4}{21}$
-9	$-\frac{36}{21}$	2	$\frac{8}{21}$
-8	$-\frac{32}{21}$	3	$\frac{12}{21}$
-7	$-\frac{28}{21}$	4	$\frac{16}{21}$
-6	$-\frac{24}{21}$	5	$\frac{20}{21}$
-5	$-\frac{20}{21}$	6	$\frac{24}{21}$
-4	$-\frac{16}{21}$	7	$\frac{28}{21}$
-3	$-\frac{12}{21}$	8	$\frac{32}{21}$
-2	$-\frac{8}{21}$	9	$\frac{36}{21}$
-1	$-\frac{4}{21}$	10	$\frac{40}{21}$
0	0		

- Si el defecto migra

$\bar{j}_c$	$\bar{j}_d = \pm \frac{2}{s}$	$\bar{v} = (\bar{j}_c + \bar{j}_d) \frac{s}{N}$	$\bar{j}_c$	$\bar{j}_d = \pm \frac{2}{s}$	$\bar{v} = (\bar{j}_c + \bar{j}_d) \frac{s}{N}$
-10	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{42}{21}$	1	$-\frac{1}{2}$	$\frac{2}{21}$
-9	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{38}{21}$	2	$-\frac{1}{2}$	$\frac{6}{21}$
-8	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{34}{21}$	3	$-\frac{1}{2}$	$\frac{10}{21}$
-7	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{30}{21}$	4	$-\frac{1}{2}$	$\frac{14}{21}$
-6	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{26}{21}$	5	$-\frac{1}{2}$	$\frac{18}{21}$
-5	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{22}{21}$	6	$-\frac{1}{2}$	$\frac{22}{21}$
-4	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{18}{21}$	7	$-\frac{1}{2}$	$\frac{26}{21}$
-3	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{14}{21}$	8	$-\frac{1}{2}$	$\frac{30}{21}$
-2	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{10}{21}$	9	$-\frac{1}{2}$	$\frac{34}{21}$
-1	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{6}{21}$	10	$-\frac{1}{2}$	$\frac{38}{21}$
0	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{2}{21}$	10	$\frac{1}{2}$	$\frac{42}{21}$

Finalmente, cuando la densidad es entera o el defecto no migra, la corriente total tiene una única contribución: la corriente colectiva $\bar{j}_c = l$, donde l es un valor entero. Por lo tanto, las posibles velocidades son

$$|\bar{v}| = |l|(s/N).$$

Pero si el defecto migra, la corriente total tiene dos contribuciones: $\bar{j} = \bar{j}_c + \bar{j}_d$. La brindada por la corriente colectiva ($\bar{j}_c = l$ entero) y la dada por la migración del defecto ($\bar{j}_d = \pm 2/s$). De este modo, las posibles velocidades son

$$|\bar{v}| = |l \pm 2/s|(s/N).$$

Cuando la corriente está dada sólo por la migración del defecto ($l = 0$), $\bar{j} = \pm 2/s$ y $\bar{v} = \pm 2/N$. En tal caso, hay una manera alternativa en determinar la corriente. Ya que el defecto tiene velocidad $\bar{v}_d = \pm 2$ y $\rho_d = 1/s$, se deduce que $\bar{j}_d = \pm 2/s$.

Por último, tanto para el caso de la densidad entera como para no entera, este análisis sólo permite establecer condiciones necesarias pero no suficientes que las corrientes tienen que satisfacer. Esto se debe a que los argumento utilizados sólo tienen en cuenta la forma del potencial de ratchet y no involucra la interacción entre las partículas.

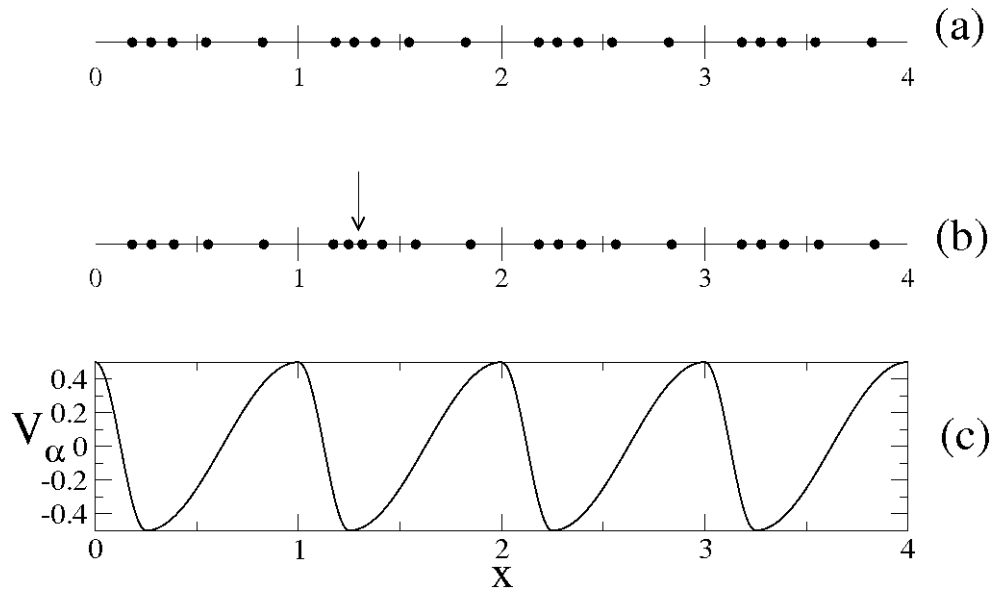


Figura 4.1: Cuando la densidad ρ es un entero, (Panel (a), $\rho = 5$) la configuración del equilibrio estático ($\Pi_\varepsilon = 0$) muestra el mismo número de partículas en cada sitio, es decir, una red perfecta. Cuando ρ no es entero, la configuración es defectuosa (Panel (b), $\rho = 5.25$). La flecha indica la partícula extra en el segundo sitio (un intersticial). En el Panel (c) se muestra el potencial de ratchet estático para $\alpha = 1/3$.

Capítulo 5

Las órbitas estacionarias para el sistema perfecto

Las ecuaciones de Langevin asociadas a la ecuación 3.1 fueron integradas al reducir las derivadas a diferencias finitas de primer orden (Método de Euler). El tiempo de integración numérica cambia entre $t = 0$ y 100 en unidades de $\tau = 2\pi/\omega$. Como se dijo anteriormente, se permite la colisión elástica entre partículas y éstas se asumen idénticas (ver Anexo C).

En la figura 5.1, se puede observar la dinámica en el plano Π_ϵ vs. Π_k con $\Pi_T = 0$, es decir, sin ruido para $\rho = 2$ (es decir, hay, en promedio, dos partículas por sitio). En ella se puede notar que:

- * para $\Pi_k = 0$ hay sólo dos separatrices: la primera que separa las regiones de $\bar{v} = -1$ y $\bar{v} = -2$ y la segunda que divide las regiones $\bar{v} = 0$ y $\bar{v} = -1$.
- * a medida que aumenta Π_k , la separatriz que divide las regiones de $\bar{v} = -1$ de la región $\bar{v} = -2$ es una curva creciente y alrededor del $\Pi_k \sim 0.30$ se quiebra convirtiéndose en una recta casi vertical.
- * la separatriz que divide las regiones de $\bar{v} = 0$ y $\bar{v} = -1$, es una recta decreciente pero, alrededor $\Pi_k = 0.75$, sale una recta casi vertical que divide las regiones $\bar{v} = -1$ y $\bar{v} = 0$.



* esta última separatriz se bifurca alrededor de $\Pi_k = 1$ generando dos separatrices: una con pendiente casi vertical y otra con pendiente casi 0.

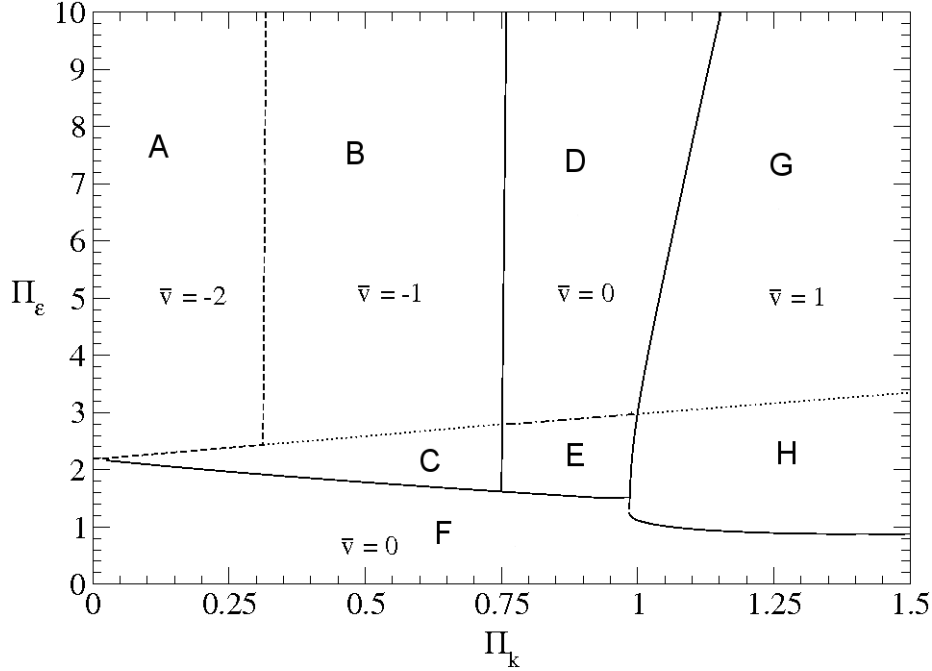


Figura 5.1: Diagrama de Fase de la dinámica en el plano Π_ϵ vs. Π_k para $\Pi_T = 0$ para el caso $\rho = 2$. El número en cada región indica la velocidad promedio (temporal) $\bar{v}$ de [59].

En la figura 5.2 se muestran las órbitas características para cada región de la figura 5.1. Cabe señalar que la separatriz creciente que se inicia en $\Pi_k = 0$ separa distintas dinámicas para una misma velocidad. Un claro ejemplo de esto se puede observar en los paneles (d), (e) y (f) de la figura 5.2 en la que cada una las partículas tienen velocidad 0 pero distintas dinámicas:

- En el panel (d) cada partícula pasa medio periodo en un mínimo y medio periodo en el mínimo contiguo pero al siguiente medio periodo regresa al primer mínimo, dado así $\bar{v} = 0$.
- En el panel (e) la mitad de las partículas se comporta de manera similar a lo descrito en el caso anterior pero la otra mitad de las partículas realiza

pequeñas oscilaciones alrededor del mínimo en el que se encuentran. De esta manera, $\bar{v} = 0$.

- En el panel (f), todas las partículas apenas oscilan alrededor de su posición de equilibrio.

De manera similar, los paneles (b) y (c), por un lado, y (g) y (h), por el otro, permiten observar el mismo fenómeno pero para $\bar{v} = -1$ y $\bar{v} = 1$, respectivamente.

Para el caso $\rho = 5$, en la figura 5.3, se puede observar la dinámica en el plano Π_ϵ vs. Π_k con $\Pi_T = 0$. La gran diferencia que se puede notar con respecto a lo observado en 5.1 es la existencia de una gran variedad de velocidades. Como en el caso anterior, las regiones están etiquetadas con los valores de $\bar{v}$ de la correspondiente órbita estacionaria. Las separatrices tienen una distribución intrincada que se pueden observar en las áreas ampliadas realizadas en las figuras 5.4, 5.5 y 5.6.

Comenzando en $\Pi_k = 0$, las separatrices nacen de un mismo punto. Una de ellas, que separa la región $\bar{v} = -2$ de la región $\bar{v} = -1.6$, es creciente y en $\Pi_k \sim 0.05$ se quiebra convirtiéndose en una recta casi vertical. El resto de las separatrices son decrecientes con pendientes similares separando las regiones de $\bar{v} = 0$, $\bar{v} = -0.2$, $\bar{v} = -0.4$, $\bar{v} = -0.6$, $\bar{v} = -0.8$, $\bar{v} = -1$, $\bar{v} = -1.2$, $\bar{v} = -1.4$, $\bar{v} = -1.6$ (observar figura 5.4).

También se puede notar que algunas regiones desaparecen al pegarse dos separatrices y, en determinado punto, éstas líneas se quiebran convirtiéndose en rectas de pendiente infinita.

A partir de $\Pi_k = 0.15$, las regiones con $\bar{v} > 0$ se ubican tanto en la parte superior como en la inferior del diagrama (ver figura 5.5). Excepto en la vecindad del $\Pi_k = 0.15$, las regiones con $\bar{v} > 0$ y $\bar{v} < 0$ están separadas por una region en la cual no hay corriente ($\bar{v} = 0$, $j = 0$).

En definitiva, al observar la figura 5.3, se puede notar que al controlar los parámetros Π_k y Π_ϵ es posible variar la corriente. Por ejemplo, manteniendo constante $\Pi_k = 0.05$ y variar Π_ϵ de 1.9 a 1.96, la corriente toma diferentes valores



$(0, -1, -2, -3, -4, -5, -6, -7, -8)$. O bien fijando $\Pi_k = 0.19$ y variando Π_ϵ de 0.7 a 1.1, se obtiene las corrientes opuestas $(0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8)$. Otro ejemplo: si $\Pi_\epsilon = 2$ y variando Π_k de 0.152 a 0.158, es posible variar la corriente de -2 a 2 .

En la figura 5.7, se muestran algunas órbitas del sistema. Allí se puede notar, como en el caso de $\rho = 2$, que existen combinaciones de parámetros que determinan una misma velocidad pero distintas dinámicas. En los paneles (c) y (d) la velocidad de las partículas es $\bar{v} = 0.4$ pero el sistema tiene comportamientos diferentes; lo mismo para los paneles (e) y (f) en donde $\bar{v} = 1.2$.

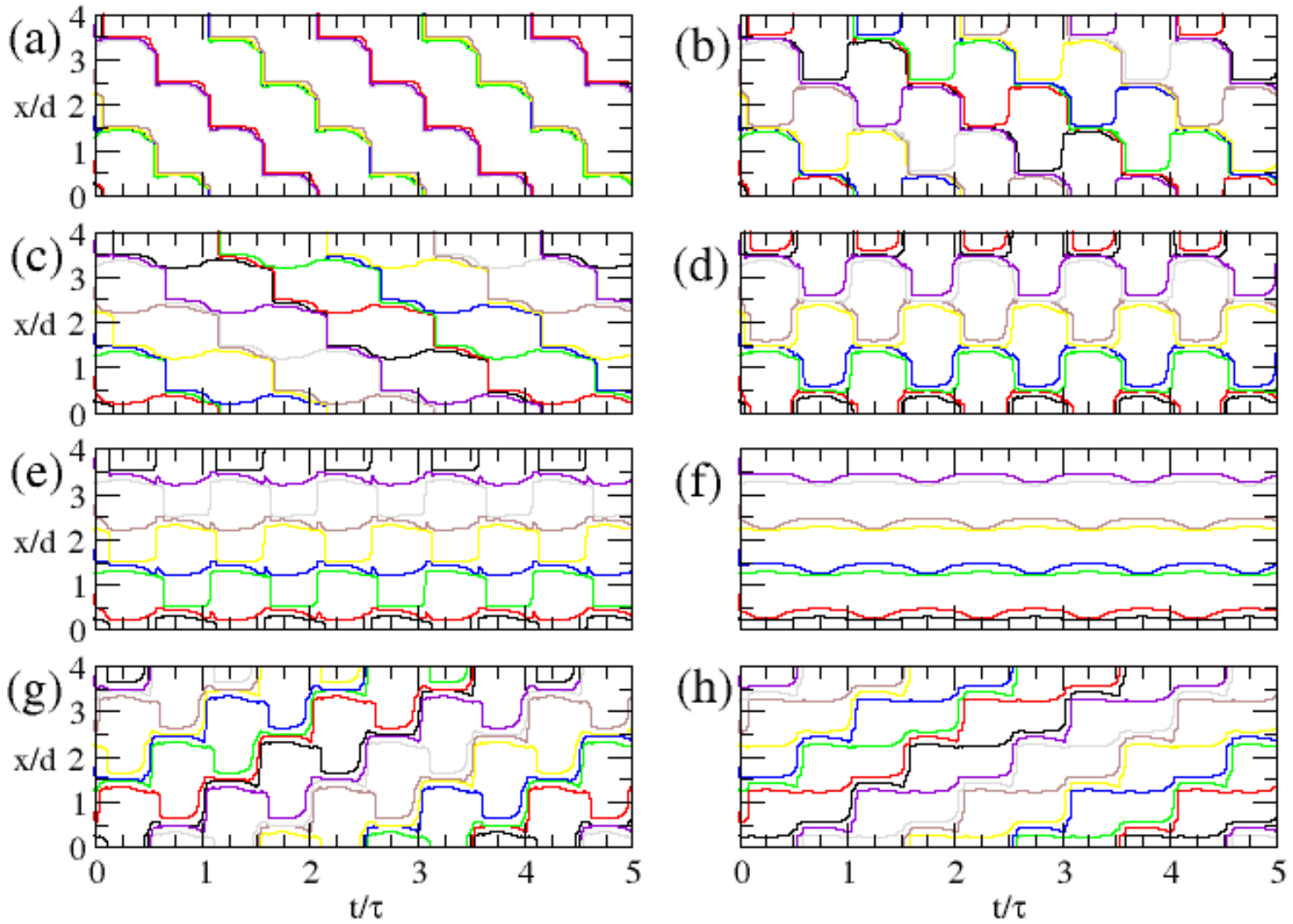


Figura 5.2: Caso $\rho = 2$: Órbitas deterministas para: (a) $\Pi_\varepsilon = 5$ y $\Pi_k = 0.25$ con $\bar{v} = -2$; (b) $\Pi_\varepsilon = 5$ y $\Pi_k = 0.5$ con $\bar{v} = -1$; (c) $\Pi_\varepsilon = 2.1$ y $\Pi_k = 0.5$ con $\bar{v} = -1$; (d) $\Pi_\varepsilon = 5$ y $\Pi_k = 0.85$ con $\bar{v} = 0$; (e) $\Pi_\varepsilon = 2.1$ y $\Pi_k = 0.85$ con $\bar{v} = 0$; (f) $\Pi_\varepsilon = 1$ y $\Pi_k = 0.5$ con $\bar{v} = 0$; (g) $\Pi_\varepsilon = 5$ y $\Pi_k = 1.25$ con $\bar{v} = 1$; (h) $\Pi_\varepsilon = 2.1$ y $\Pi_k = 1.25$ con $\bar{v} = 1$.

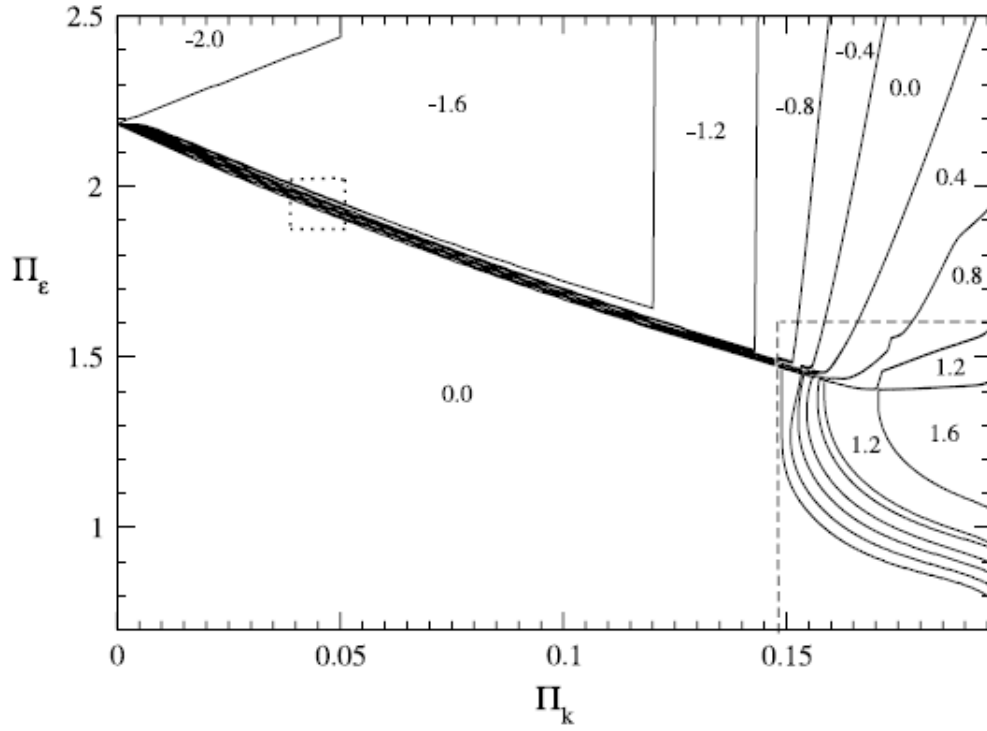


Figura 5.3: Diagrama de Fase de la dinámica en el plano Π_ϵ vs. Π_k para $\Pi_T = 0$ para el caso $\rho = 5$. El número en cada región indica la velocidad promedio (temporal) $\bar{v}$. Las ventanas punteadas indican regiones ampliadas en las figuras 5.4 y 5.5

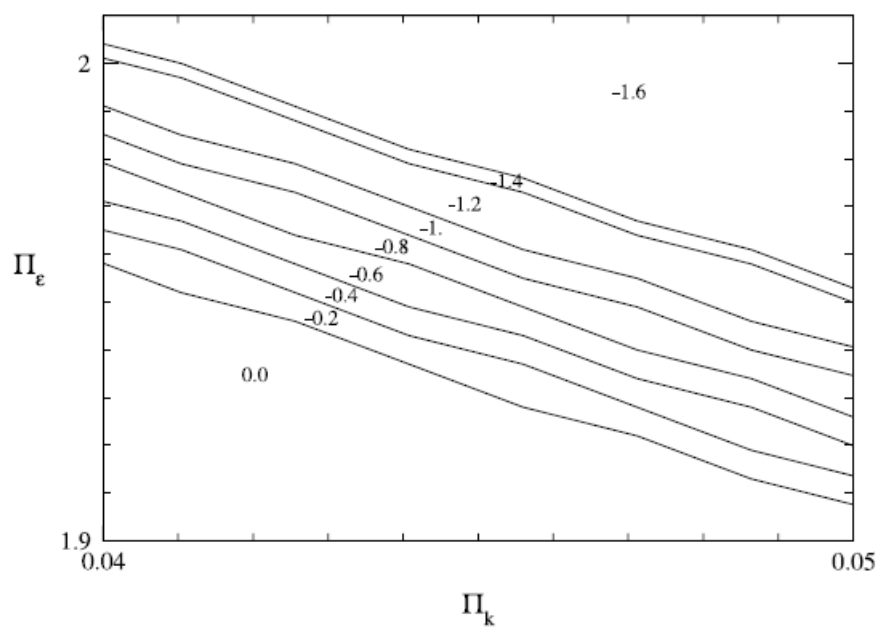


Figura 5.4: Zoom al diagrama de fase de la dinámica en el plano Π_ϵ vs. Π_k correspondiente al marco punteado indicado en la figura 5.3

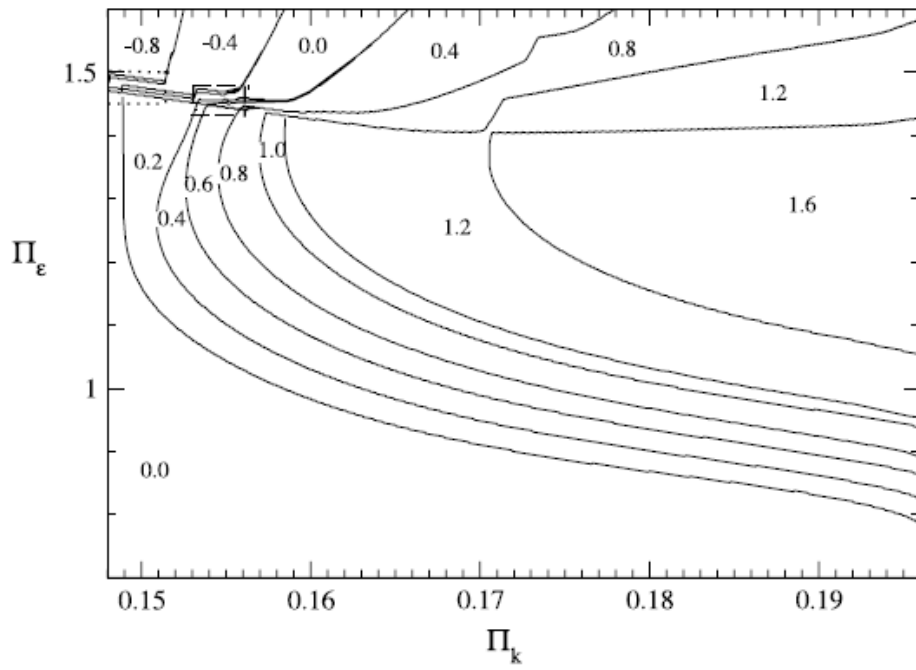


Figura 5.5: Zoom al diagrama de fase de la dinámica en el plano Π_ϵ vs. Π_k correspondiente al 2° marco indicado en la figura 5.3. Las ventanas punteadas indican regiones ampliadas en la figura 5.6

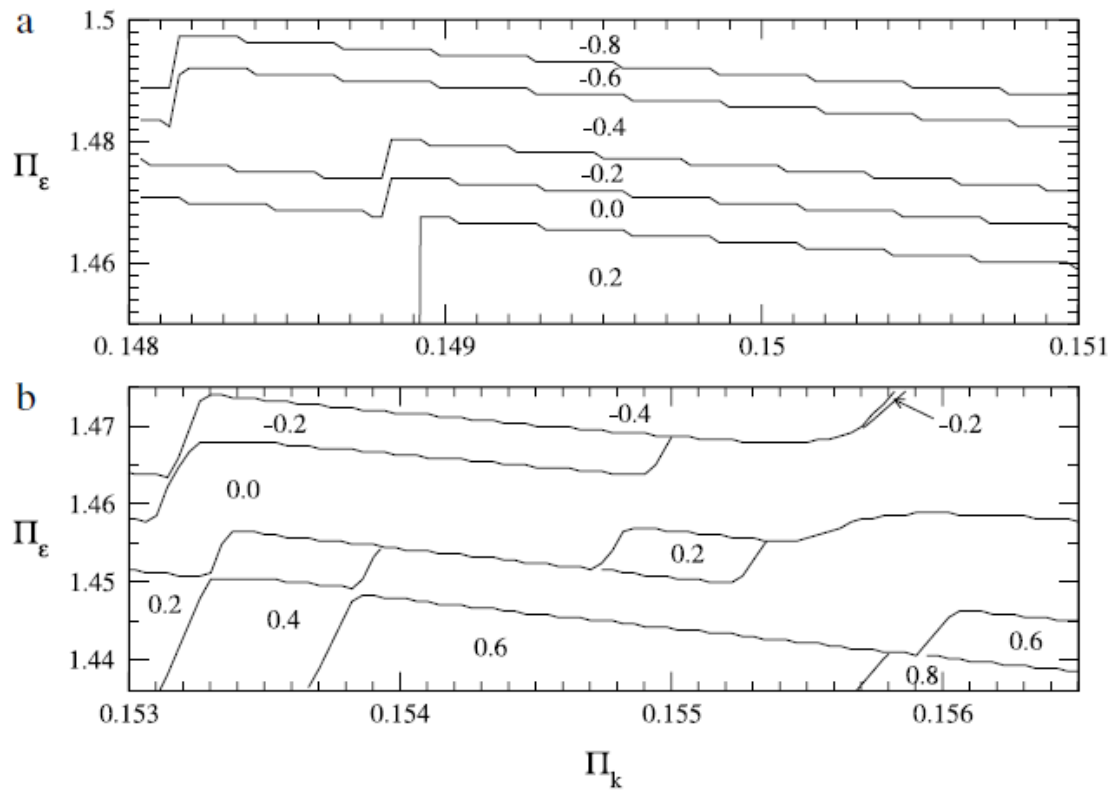


Figura 5.6: a) Zoom al diagrama de fase de la dinámica en el plano Π_ϵ vs. Π_k correspondiente al marco punteado indicado en la figura 5.5. b) Zoom al diagrama de fase de la dinámica en el plano Π_ϵ vs. Π_k correspondiente al 2° marco indicado en la figura 5.5.

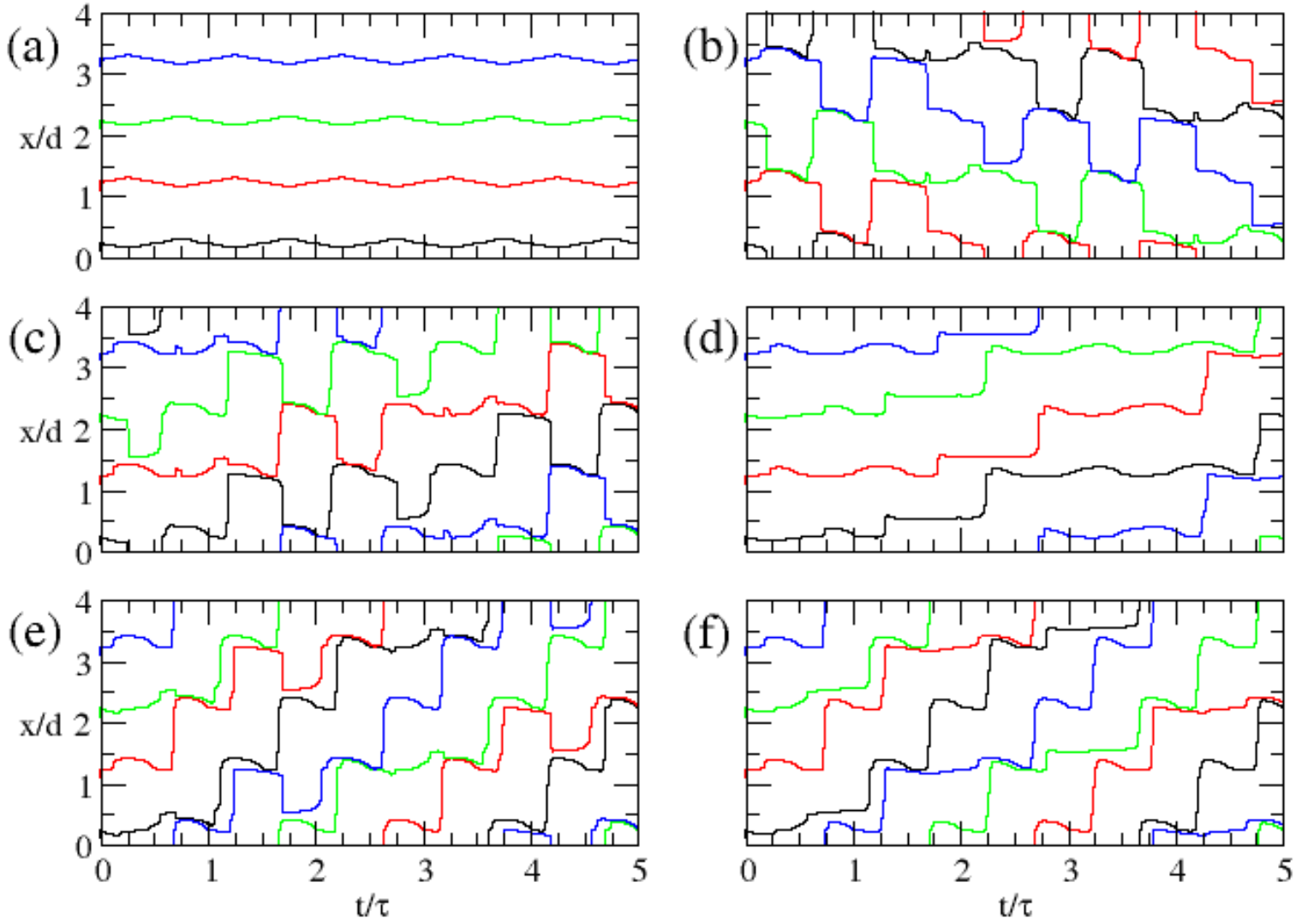


Figura 5.7: Caso $\rho = 5$: Órbitas deterministas de las partículas 1 (negro), 6 (rojo), 11 (verde) y 16 (azul) para: (a) $\Pi_\varepsilon = 1.5$ y $\Pi_k = 0.1$ con $\bar{v} = 0$; (b) $\Pi_\varepsilon = 1.6$ y $\Pi_k = 0.155$ con $\bar{v} = -0.4$; (c) $\Pi_\varepsilon = 1.55$ y $\Pi_k = 0.17$ con $\bar{v} = 0.4$; (d) $\Pi_\varepsilon = 0.96$ y $\Pi_k = 0.17$ con $\bar{v} = 0.4$; (e) $\Pi_\varepsilon = 1.47$ y $\Pi_k = 0.18$ con $\bar{v} = 1.2$; (f) $\Pi_\varepsilon = 1.1$ y $\Pi_k = 0.18$ con $\bar{v} = 1.2$.

Capítulo 6

Las órbitas estacionarias para el sistema defectuoso

Tal como se dijo en el capítulo 4, llamaremos sistema defectuoso a aquel que en $s - 1$ sitios haya la misma cantidad de partículas y en un único sitio haya sólo una partícula extra. En otras palabras, $N = (s \times l) + 1$, donde l es entero y, de esta manera, ρ no es entero. Esto difiere de lo planteado en [64] en donde el defecto era incluido en el potencial de ratchet que no es comparable con los defectos que pueden surgir en una red perfecta.

El primer caso que se estudio es en cual hay 9 partículas en 4 sitios por lo que la densidad ρ vale $9/4$. El diagrama de fase de la dinámica se puede observar en la figura 6.1. Los valores de las corrientes en cada región son $0, \pm 0.5, \pm 1.5, \pm 2.5, 4.5$. Los valores ± 0.5 corresponden a sólo la migración del defecto, mientras que los otros valores tienen, además, la contribución colectiva.

Analizando la figura 6.1, la región en donde el sistema perfecto ($N = 8, s = 4$ ver figura 5.1) tiene velocidad promedio nula ahora está dividida en regiones con diferentes velocidades, en particular dos regiones contiguas ($\bar{v} = 2/9, \bar{v} = -2/9$) se deben a que sólo el defecto migra. En la figura 6.2, se grafican algunas órbitas.

Se observó el mismo fenómeno para el caso $N = 21$ y $s = 4$ (ver figura 6.3). Allí se puede notar corrientes puramente colectivas (1, 2, 3, 4, 5, 6), corrien-

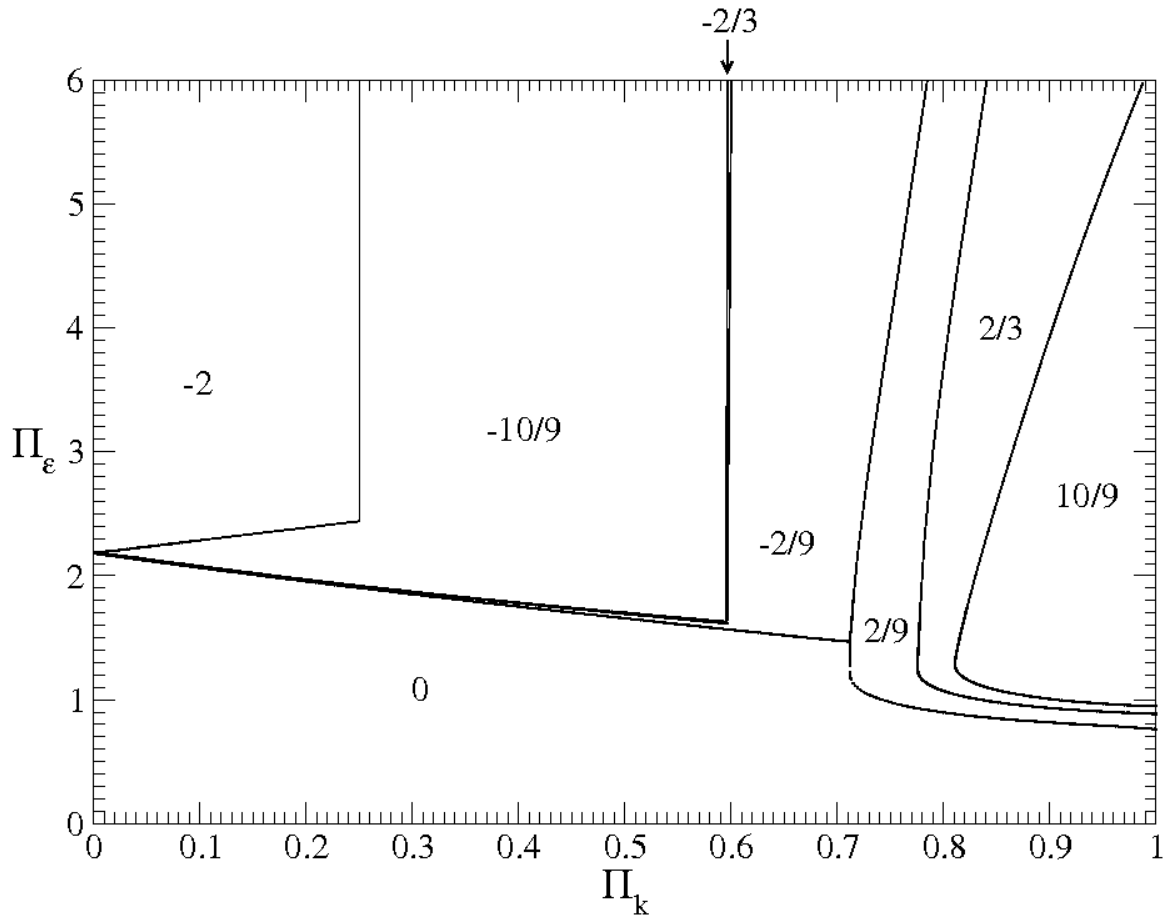


Figura 6.1: Diagrama de fase de la dinámica en el plano Π_k vs. Π_ϵ para $\Pi_T = 0$ y $\rho = 9/4$.

tes en donde están presentes tanto la contribución colectiva como la del defecto ($1.5, \pm 2.5, 3.5, \pm 4.5, 5.5, 6.5, 7.5, 8.5$) y regiones $\bar{j} = \bar{j}_d = \pm 0.5$ que corresponden sólo a la migración del defecto. Ésto último, nuevamente, aparece en donde el sistema perfecto de 20 partículas muestra una región de corriente nula. En la figura 6.4 se ejemplifican diversas órbitas.

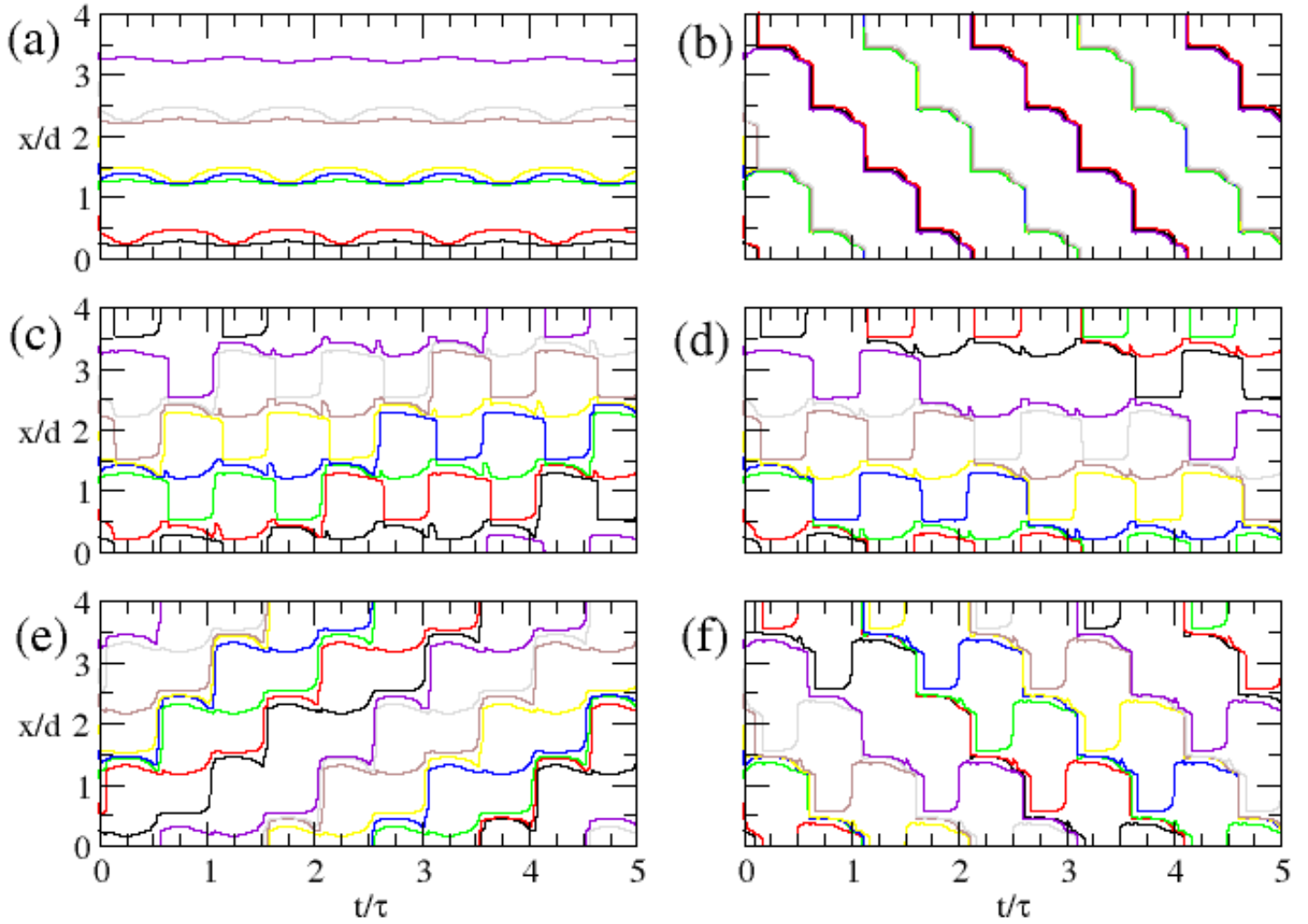


Figura 6.2: Caso $\rho = 9/4$: Órbitas deterministas para: (a) $\Pi_\varepsilon = 1$ y $\Pi_k = 0.4$ con $\bar{v} = 0$; (b) $\Pi_\varepsilon = 3$ y $\Pi_k = 0.1$ con $\bar{v} = -2$; (c) $\Pi_\varepsilon = 2$ y $\Pi_k = 0.75$ con $\bar{v} = 2/9$; (d) $\Pi_\varepsilon = 2$ y $\Pi_k = 0.65$ con $\bar{v} = -2/9$; (e) $\Pi_\varepsilon = 3$ y $\Pi_k = 0.9$ con $\bar{v} = 10/9$; (f) $\Pi_\varepsilon = 3$ y $\Pi_k = 0.4$ con $\bar{v} = -10/9$.

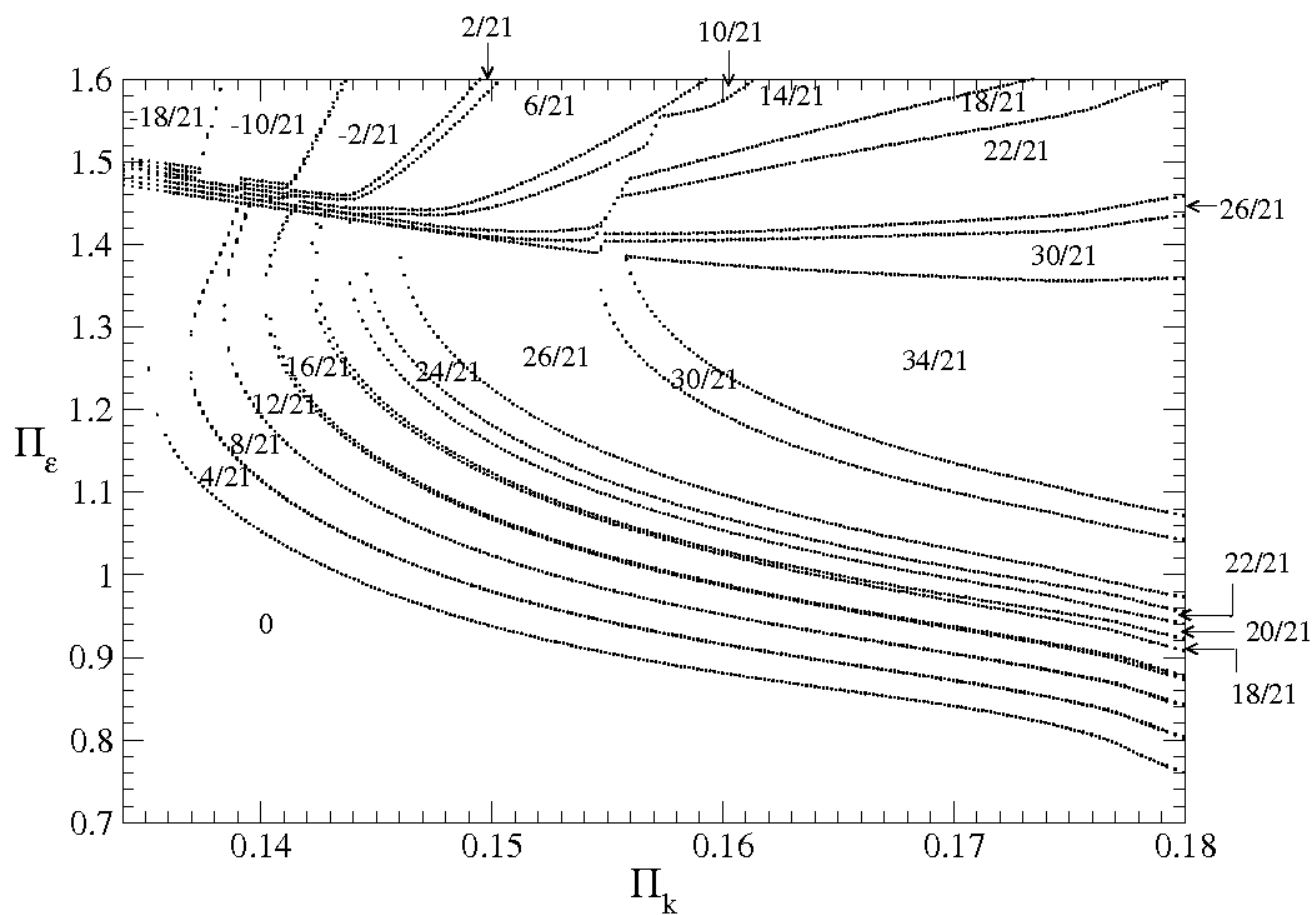


Figura 6.3: Diagrama de fase de la dinámica en el plano Π_k vs. Π_ϵ para $\Pi_T = 0$ y $\rho = 21/4$.

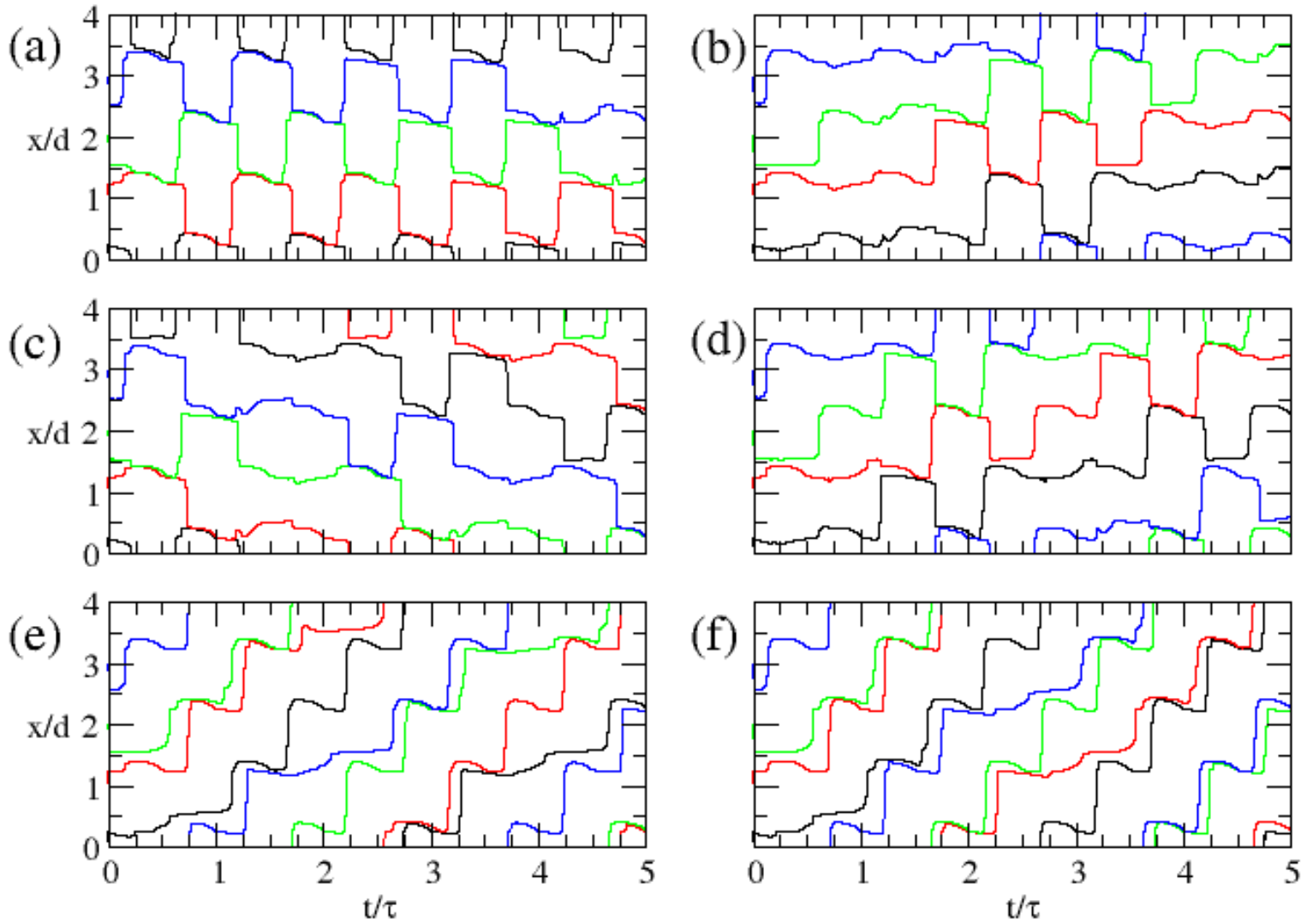


Figura 6.4: Caso $\rho = 21/4$: Órbitas deterministas de las partículas 1 (negro), 6 (rojo), 11 (verde) y 16 (azul) para: (a) $\Pi_\epsilon = 1.54$ y $\Pi_k = 0.145$ con $\bar{v} = -\frac{2}{21}$; (b) $\Pi_\epsilon = 1.54$ y $\Pi_k = 0.153$ con $\bar{v} = \frac{2}{21}$; (c) $\Pi_\epsilon = 1.52$ y $\Pi_k = 0.14$ con $\bar{v} = -\frac{10}{21}$; (d) $\Pi_\epsilon = 1.52$ y $\Pi_k = 0.155$ con $\bar{v} = \frac{10}{21}$; (e) $\Pi_\epsilon = 1.12$ y $\Pi_k = 0.17$ con $\bar{v} = \frac{30}{21}$; (f) $\Pi_\epsilon = 1.3$ y $\Pi_k = 0.17$ con $\bar{v} = \frac{34}{21}$.

Capítulo 7

El efecto del Ruido

Teniendo en cuenta los resultados de las secciones previas, surge la inquietud si es posible revertir la corriente con la simple adición de ruido en el sistema determinista. Algunos trabajos estudiaron esta posibilidad usando ruido coloreado o fuentes de ruido correlacionado [24, 25, 26].

El efecto de las fluctuaciones termal se pueden estudiar mediante la conexión que existe entre la dinámica determinista y la ruidosa. En particular, en esta sección se estudia el efecto de agregar ruido Gaussiano blanco tanto al sistema perfecto como al defectuoso.

Al inspeccionar la figura 5.5, se puede esperar que, para ciertos valores de Π_k y Π_ε , agregar una cantidad adecuada de ruido en el sistema determinista puede generar diferentes valores de corrientes. Esta afirmación puede confirmarse al observar los graficos de la figura 7.1 en donde se muestra el valor promedio $\langle \bar{v} \rangle$ sobre 20 realizaciones de ruido y condiciones iniciales en función de la intensidad de ruido Π_T .

Los paneles (a), (b) y (c) de la figura 7.1 corresponden a las órbitas deterministas con $\bar{v} = 0.2, \bar{j} = 1$; $\bar{v} = 0.6, \bar{j} = 3$ y $\bar{v} = 1, \bar{j} = 5$ respectivamente. En todos los casos, la inversión de la corriente se obtienen claramente al adicionar ruido al sistema.

Cabe señalar que, en cada caso, la inversión de la corriente se produce por una mezcla de trayectorias estacionarias de diferentes regiones. La figura 7.2 es



un claro ejemplo de esto. Los paneles (a), (b), (c) y (d) muestran la posición de una partícula en el anillo en función del tiempo t/τ correspondientes a cuatro trayectorias estacionarias deterministas diferentes: $\bar{v} = 1, \bar{j} = 5$; $\bar{v} = 0.4, \bar{j} = 2$; $\bar{v} = 0, \bar{j} = 0$ y $\bar{v} = -0.4, \bar{j} = -2$ respectivamente. A pesar de que el sistema tiene más de una partícula, en particular tiene $N = 20$, todas son equivalentes por lo que alcanza con estudiar la trayectoria de una sola.

De este modo, se puede decir que al agregar una determinada y adecuada cantidad de ruido es posible observar distintas velocidades y, en especial, invertir la corriente. Este se puede notar en figuras 7.1 y 7.2, en particular:

- la adición de ruido en la órbita de la fig. 7.2 (a) lleva a la velocidad de la fig. 7.1 (c).
- cuando la intensidad de ruido es la indicada por la flecha e, las trayectorias típicas son las mostradas en la figura 7.2 (e): que es una mezcla de las trayectorias deterministas (b) y (c).
- el ruido indicado con la flecha (f) corresponde con la trayectoria de la figura 7.2(f) que es muy similar a la órbita determinista (c).
- la órbita típica cuando el ruido es el indicado por la flecha (g) se muestra en la figura 7.2 (g), la cual es un mix de las órbitas deterministas (c) y (d) (aquí se puede observar la inversión de la corriente).
- cuando el ruido es suficientemente intenso (flecha h), el movimiento se convierte en browniano (Fig. 7.2 (h)).

En el sistema defectuoso, se tomaron los valores en el espacio de parámetros donde no hay corriente colectiva, es decir, en donde $j_c = 0$. Para $N = 9$, se muestran las órbitas en la figura 7.3 (a) y (c) en donde los parámetros Π_ϵ y Π_k corresponden a las regiones de $\bar{v} = \pm 2/9$ respectivamente. La adición de ruido Gaussiano blanco al sistema, manteniendo los valores de los parámetros constantes, produce una reversión en la dirección de la corriente como se puede ver en la figura 7.3(a) y (b).

Un efecto similar se observa para $N = 21$. La figura 7.6(a) y (b) muestra las órbitas deterministas para $\bar{v} = \pm 2/21$. Manteniendo los parámetros $\Pi_k = 0.1487$ y $\Pi_\epsilon = 1.561$ fijos, $\bar{v} = 2/21$ (fig.(7.6(a))) y el hecho de agregar ruido al sistema genera diferentes velocidades. En la figura 7.5 se grafica la velocidad $\langle \bar{v} \rangle$ de las partículas en función del ruido. Los brackets indican el valor medio sobre 20 realizaciones. Aquí se puede notar que inicialmente (para valores bajos de ruido) la velocidad aumenta, llegando a un máximo y luego disminuye pasando por la velocidad nula y luego se revierte. Las trayectorias ruidosas se muestran en la figura 7.6 corresponden a los valores de ruido indicados por las flechas en el gráfico 7.5.

Este comportamiento en presencia de un moderado valor de ruido se puede relacionar a lo que sucede con los resonadores estocásticos y a las ratchets estocásticas. La dinámica determinista es, en general, robusta a la presencia de ruido por lo que se puede inducir transiciones entre diferentes trayectorias estacionarias. En el caso de la resonancia, el sistema biestable perturbado por una fuerza monocromática, el sistema determinista tiene dos tipos de dinámicas: libraciones de pequeñas amplitudes alrededor de cada mínimo y más allá de un cierto valor de la perturbación, hay libraciones de gran amplitud entre los mínimos. La adición de un ruido óptimo cuando las libraciones son pequeñas lleva a tener la dinámica de libraciones de mayor amplitud. En el caso de las Ratchets estocásticas, el sistema determinista presenta tanto libraciones de pequeña amplitud como una rotación direccional dependiendo de los valores de los parámetros.

Al sumar ruido al sistema cuando están presentes las libraciones produce una transición a la rotación direccional. En el sistema de ratchet defectuoso con $N = 9$, la adición de ruido al sistema determinista con $\bar{j} = \bar{j}_d$, induce una transición a la trayectoria estacionaria con $\bar{j} = -\bar{j}_d$. Esto se puede observar claramente en la figura 7.3. Para $N = 21$, las transiciones producidas por el ruido no se restringen sólo a la órbita estacionaria con $\bar{j} = -\bar{j}_d$ (situación mostrada en la figura 7.4) sino que también a aquellas suficientemente cercanas en el espacio de parámetros. De este modo, las trayectorias ruidosas están compuestas por piezas de distintas trayectorias deterministas, algunas de las cuales tienen corrientes colectivas. Esto



explica el porqué la velocidad promedio mostrada en la figura 7.5 toma valores absolutos mayores a $\bar{j}_d$.

Cabe señalar que en [65] se mostró que la cantidad N de partículas en la red, la intensidad y la interacción de estas con el medio ruidoso, juegan un papel importante en la sincronización y en el proceso de transporte de las mismas. Sumado a esto, en [60] se mostró que la intensidad del ruido puede realzar la corriente. Por lo que este trabajo confirma las conclusiones de ambos trabajos.

En distintos trabajos[27, 28, 29], los autores fueron capaces de invertir la corriente variando distintos parámetros del sistema, tales como la cantidad de partículas, la amplitud y la frecuencia del forzante externo, etc. Por ejemplo, en [66], los autores trabajan con un potencial periódico en el espacio bajo la influencia de un campo externo periódico en el tiempo y homogéneo en el espacio y consiguen una inversión al cambiar el campo externo. En cambio, en este trabajo se obtuvo un resultado similar con sólo la adición de una moderada cantidad de ruido, sin variar el resto de los parámetros del sistema. Una situación similar es la que se plantean en [67, 68] en donde, con la simple adición de ruido, pudieron cambiar la dirección de la corriente (ambos trabajos plantean la posibilidad de, mediante la aplicación sus modelos, diseñar artefactos capaces de separar partículas). Como así también [69], allí se estudia una ratchet de Lévi forzado por ruido α estable¹ modulado periódicamente y allí encuentran que pueden revertir la corriente variando la tasa de modulación de la asimetría del ruido.

¹El ruido α estable o tipo Lévi es la generalización del ruido Gaussiano pero con la propiedad que puede ser asimétrico.

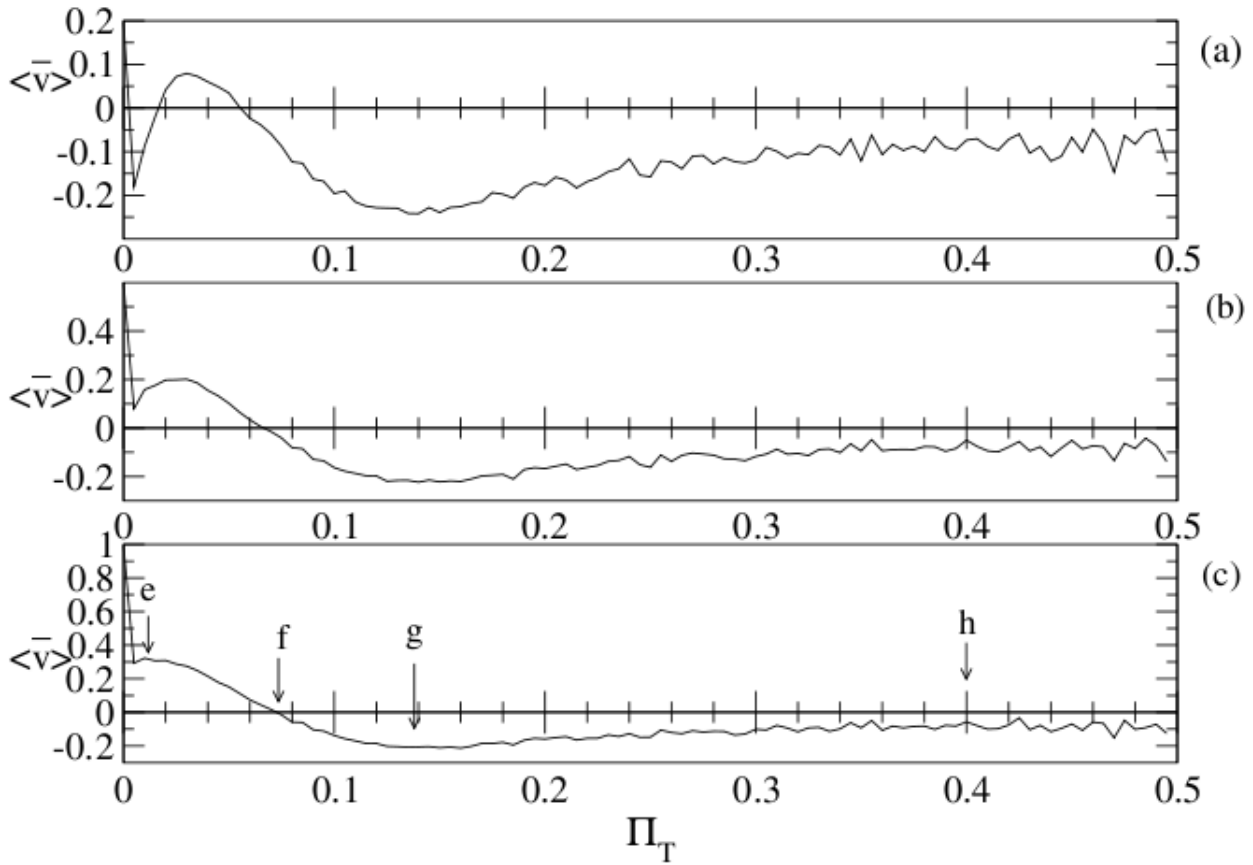


Figura 7.1: Para el caso $N = 20, s = 4$ se muestra la velocidad promedio $\langle \bar{v} \rangle$ (sobre 20 realizaciones) vs. la intensidad de ruido Π_T para los parámetros: (a) $\Pi_k = 0.15, \Pi_\varepsilon = 1.425$; (b) $\Pi_k = 0.155, \Pi_\varepsilon = 1.430$; (c) $\Pi_k = 0.158, \Pi_\varepsilon = 1.422$. Las flechas (etiquetadas e, f, g, y h) indican los valores de ruido correspondientes a las órbitas típicas mostradas en la figura 7.2.

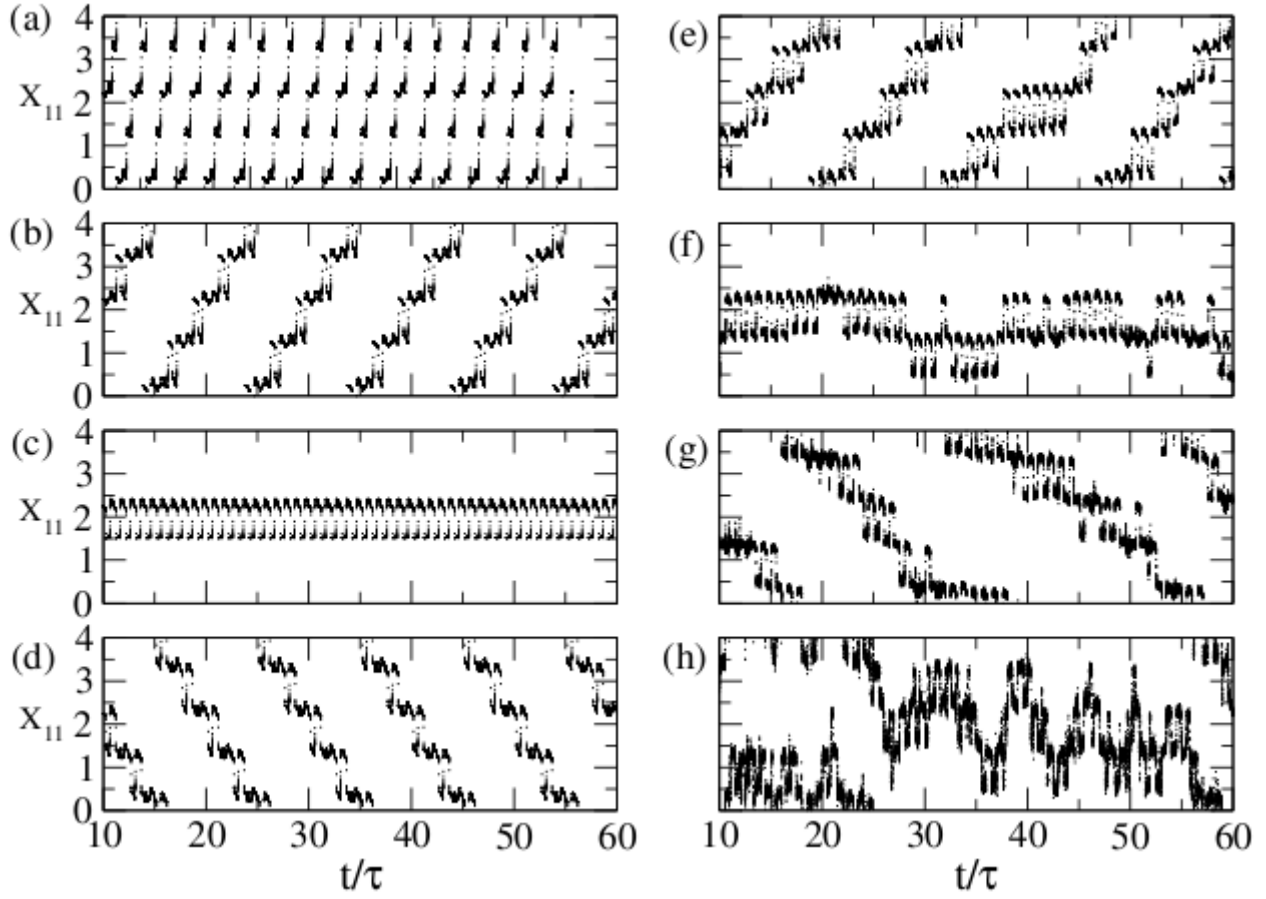


Figura 7.2: Posición en el anillo de una partícula en función de t/τ para $N = 20$, $s = 4$. Las trayectorias deterministas para $\Pi_k = 0.158$ y: (a) $\Pi_\epsilon = 1.422$ y $\bar{v} = 1$; (b) $\Pi_\epsilon = 1.4448$ y $\bar{v} = 0.4$; (c) $\Pi_\epsilon = 1.5$ y $\bar{v} = 0$; (d) $\Pi_\epsilon = 1.6$ y $\bar{v} = -0.4$. Para $\Pi_k = 0.158$ y $\Pi_\epsilon = 1.158$, las trayectorias ruidosas con: (e) $\Pi_T = 0.01032$; (f) $\Pi_T = 0.0725$, (g) $\Pi_T = 0.1386$; (h) $\Pi_T = 0.4$.

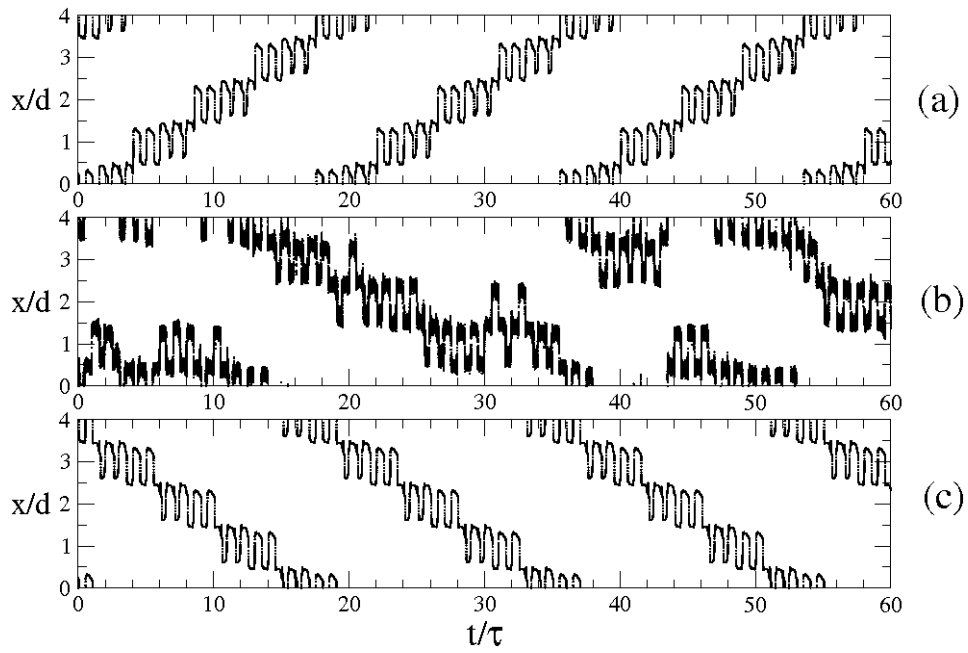


Figura 7.3: Órbitas para $N = 9$, $s = 4$: (a) órbita determinista, $\Pi_T = 0$, $\Pi_k = 0.7348$, $\Pi_\varepsilon = 3.0$ y $\bar{v} = 2/9$; (b) órbita ruidosa $\Pi_T = 0.15$, $\Pi_k = 0.7348$, $\Pi_\varepsilon = 3.0$; (c) órbita determinista, $\Pi_T = 0$, $\Pi_k = 0.7348$, $\Pi_\varepsilon = 3.35$ y $\bar{v} = -2/9$. Al agregar ruido Gaussiano en (a) se obtiene (b) que reproduce (c), invirtiendo la corriente.

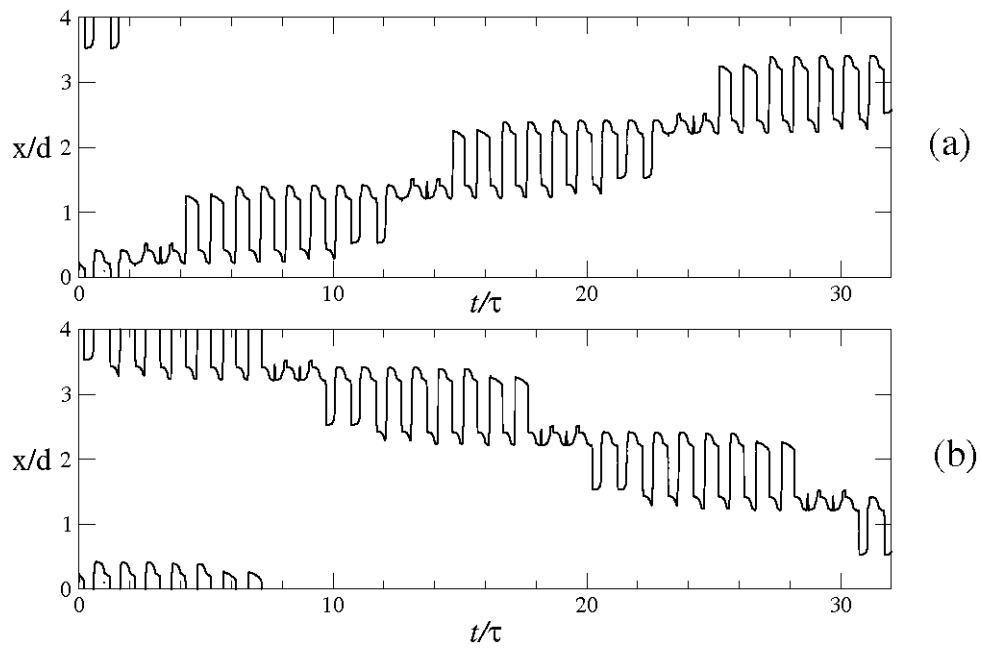


Figura 7.4: Órbitas para $N = 21$, $s = 4$: (a) órbita determinista, $\Pi_T = 0$, $\Pi_k = 0.1487$, $\Pi_\epsilon = 1.561$ y $\bar{v} = 2/21$; (b) órbita determinista, $\Pi_T = 0$, $\Pi_k = 0.1487$, $\Pi_\epsilon = 1.59$ y $\bar{v} = -2/21$.

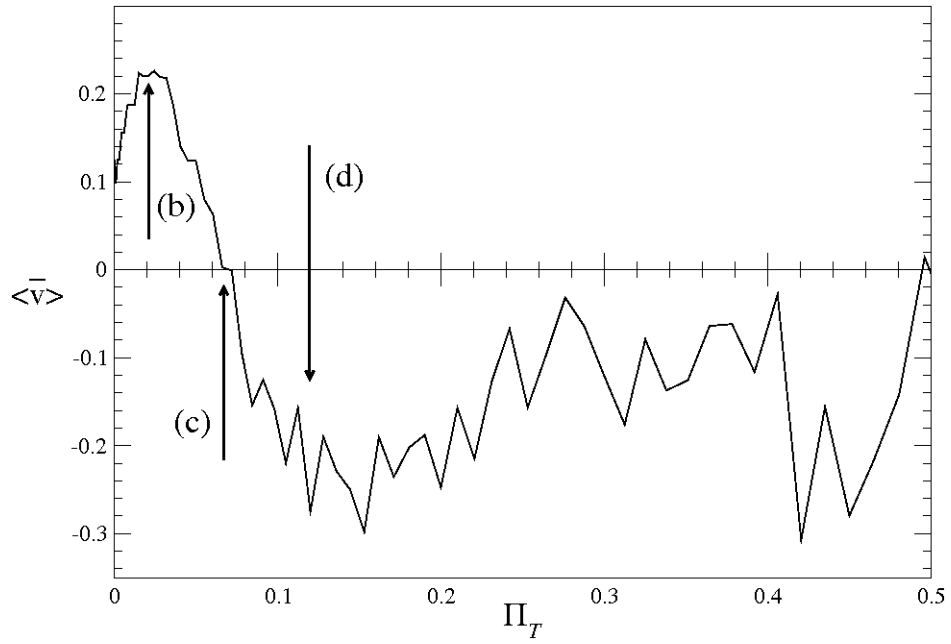


Figura 7.5: Para el caso $N = 21$, $s = 4$ se muestra la velocidad promedio $\langle \bar{v} \rangle$ (sobre 20 realizaciones) vs. la intensidad de ruido Π_T para los parámetros $\Pi_k = 0.1487$ y $\Pi_\varepsilon = 1.561$. La flechas (etiquetadas b, c y d) indican los valores de ruido correspondientes a las órbitas típicas mostradas en la figura 7.6.

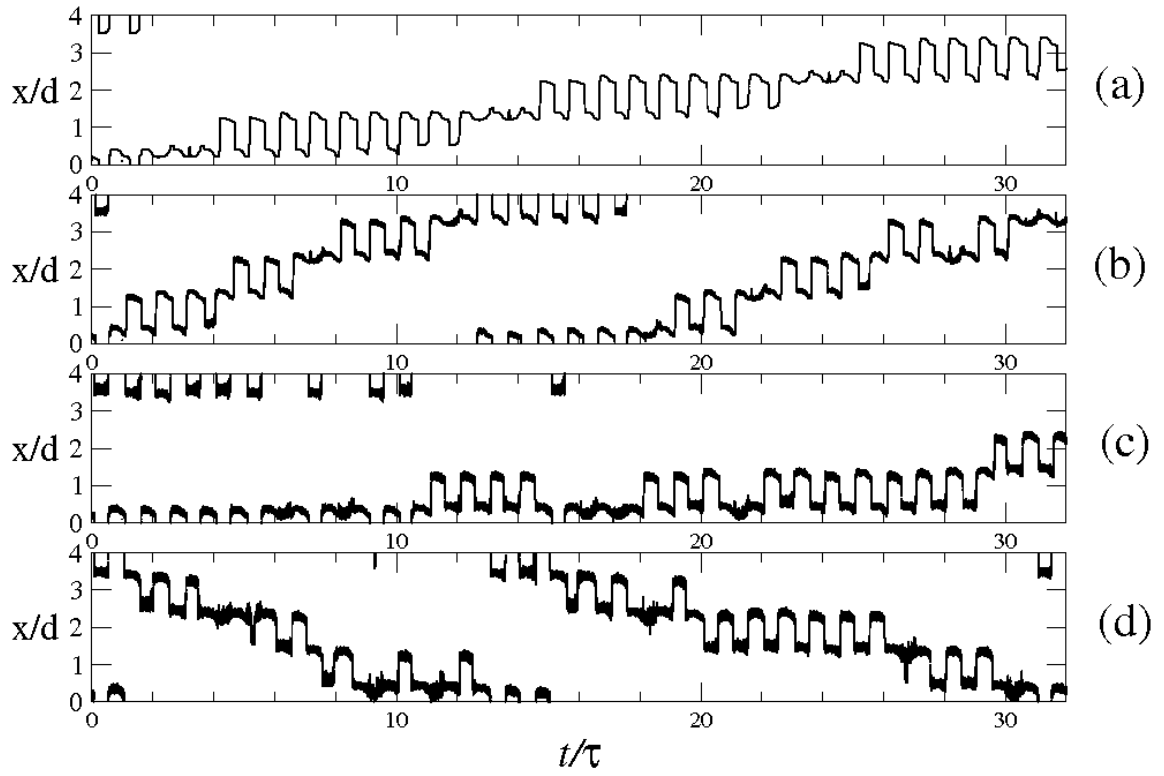


Figura 7.6: Posición en el anillo de una partícula en función de t/τ para $N = 21, s = 4$. (a) La órbita determinista $\Pi_T = 0$. (b) Órbita típica correspondiente al máximo, $\Pi_T = 0.02048$. (c) Órbita típica $\bar{v} = 0$ ($\Pi_T = 0.068445$). (d) Órbita típica en la cual el ruido induce una inversión de corriente, $\Pi_T = 0.120125$.

Capítulo 8

Conclusiones

En este trabajo se estudió la dinámica de un sistema de ratchet determinista que consiste en partículas interactuantes en un régimen sobreamortiguado. Se determinaron las posibles corrientes del sistema determinista tanto cuando el mismo es perfecto (todos los sitios tienen, en promedio, la misma cantidad de partículas):

$$-2\rho \leq \bar{j} \leq 2\rho$$

donde ρ es la densidad de partículas por sitio. En el caso del sistema defectuoso, si el defecto no migra

$$-2 \left(\frac{N-1}{s} \right) \leq \bar{j} \leq 2 \left(\frac{N-1}{s} \right),$$

y si el defecto migra

$$-2 \left(\frac{N-1}{s} \right) - \frac{2}{s} \leq \bar{j} \leq 2 \left(\frac{N-1}{s} \right) + \frac{2}{s}$$

siendo N la cantidad total de partículas del sistema y s la cantidad de sitios. Allí se determinó que existen corrientes colectivas en ambos casos y existe la posibilidad de una corriente defectuosa en el sistema no perfecto. Una cuestión importante para remarcar es que en el límite termodinámico, es decir $N \rightarrow \infty$ y $s \rightarrow \infty$ tal que $\frac{N}{s}$ resulta finito, la corriente aportada por el defecto ($\bar{j}_d$) desaparece. En contraposición, la corriente colectiva ($\bar{j}_c$) permanece finita debido que la corriente defectuosa es el efecto de una sola partícula.



Por otro lado, se realizaron simulaciones numéricas variando distintos parámetros del sistema. Encontrándose diferentes corrientes, no sólo en magnitud sino también en su dirección. Además, se encontró límites (separatrices) entre las diversas regiones en el espacio de parámetros. Asimismo, las corrientes están cuantificadas ya que su magnitud está vinculada a los saltos de los clusters con distintas cantidades de partículas entre mínimos adyacentes del potencial de ratchet. De este modo, la distribución de las separatrices en algunas regiones del espacio de parámetros implicaba que la variación continua de los parámetros lleva a un cambio discreto en la corriente. Otro aspecto para señalar es que en este trabajo se consideró como un sistema defectuoso a aquel en el había una partícula extra en una red perfecta, pero también se puede considerar como un sistema defectuoso a aquella red perfecta en la cual hay una partícula menos, es decir, $N = (s \times l) - 1$ con l entero. Esto último es equivalente a decir a que hay una vacancia en la red y el comportamiento del sistema será similar puesto que el flujo vendrá dado por

$$-2 \left(\frac{N+1}{s} \right) - \frac{2}{s} \leq \bar{j} \leq 2 \left(\frac{N+1}{s} \right) + \frac{2}{s}$$

si la vacancia migra, donde N es la cantidad total de partículas, puesto que:

- para $\frac{s}{2} - 1$ sitios, si una cantidad r de las $n - n'$ partículas del sitio i que migran lo hacen al sitio $i - 1$ y el resto, $n - n' - r$, lo hacen al sitio $i + 1$, el flujo es

$$(n - n' - r) - r = n - n' - 2r$$

- para $\frac{s}{2}$ sitios, si una cantidad r' de las $m - m'$ partículas del sitio j que migran lo hacen hacia el sitio $j - 1$ y el resto, $m - m' - r'$, lo hacen hacia el sitio $j + 1$, el flujo es

$$(m - m' - r') - r' = m - m' - 2r'$$

- para el sitio restante, cuando la vacancia migre hacia el sitio siguiente (-1) o bien hacia el sitio anterior $(+1)$

$$(n - n' - (r \mp 1)) - (r \mp 1) = n - n' - 2(r \mp 1)$$

entonces,

$$\begin{aligned}\phi_p &= \frac{\left(\frac{s}{2} - 1\right)(n - n' - 2r) + \frac{s}{2}(m - m' - 2r') + (n - n' - 2(r \mp 1))}{s} \\ \phi_p &= \frac{\frac{s}{2}(n - n' - 2r) + \frac{s}{2}(m - m' - 2r') \mp 2}{s} \\ \phi_p &= \frac{\frac{s}{2}(n + m - (n' + m') - 2(r + r'))}{s} \mp \frac{2}{s}\end{aligned}$$

como $n + m = n' + m'$,

$$\phi_p = -(r + r') \mp \frac{2}{s}.$$

Sumado a esto, la inclusión de ruido blanco no correlacionado al sistema verifica la robustez del sistema determinista. Es decir, es posible reconocer estructuras vinculadas a las trayectorias deterministas en las trayectorias ruidosas. En particular, cuando los parámetros del sistema determinista están en una zona cercana a otra región la cual la órbita determinista tiene una corriente opuesta, la adición de ruido puede provocar una inversión en la corriente.

Una posible aplicación de este modelo es el diseñar artefactos capaces de la segregar partículas. Es decir, permitiría desarrollar un dispositivo capaz de separar masas, moléculas, etc. Cabe señalar que en el sistema unidimensional las partículas no se pueden interpenetrar por lo que se debe considerar un sistema de al menos dos dimensiones para permitir esto. Diferentes trabajos [13, 74, 75] ya se han enfocado hacia esa dirección: basándose en la separación de cadenas de monómeros según la longitud de las mismas, han establecidos posibles artefactos para segregar de fragmentos de ADN. Un análisis similar fue realizado en [11, 76], allí los autores estudian la dinámica de un polímero en un potencial de flashing ratchet, es decir, el potencial es encendido y apagado cada cierto tiempo t . Lo que se propondría hacer es analizar si es posible segregar cadenas de monómeros utilizando el potencial propuesto en la ecuación 3.2.

En el estudio del sistema bidimensional, una cuestión importante a considerar es el tipo de interacción entre las partículas a modelar. Esto se debe a que si el objetivo es simular, por ejemplo, cadenas de ADN en un potencial de ratchet, la interacción entre los elementos de la cadena debe ser lo más realista posible. Un



posible potencial a considerar es el potencial de Lennard-Jones¹[77]

¹El potencial de Lennard-Jones es de la forma

$$V_{LJ}(r) = 4\epsilon_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$

donde r es la distancia entre las partículas, ϵ_0 es la profundidad del potencial, r_0 es la distancia en la que el potencial es cero. Estos dos últimos parámetros dependen de las moléculas que se estén modelando.

Apéndice

Apéndice A

Coeficiente de Difusión

Albert Einstein dedujo en su trabajo del año 1905 [36] una expresión para el coeficiente de Difusión.

Einstein partió del hecho que las partículas están dispersas de manera irregular en un líquido y consideró que están en equilibrio dinámico, asumiendo que una fuerza K (dependiente de la posición pero no del tiempo) actúa sobre las partículas de manera individual.

Si ν es la cantidad de partículas suspendidas por unidad de volumen, teniendo en cuenta la condición de equilibrio dinámico, ν es una función de la posición x tal que la variación de energía libre F desaparece para cualquier desplazamiento δx :

$$\delta F = \delta E - T\delta S = 0$$

siendo S la Entropía, E la Energía del sistema y T es la temperatura absoluta.

Para deducir el coeficiente, Einstein asumió que el líquido se encuentra en un plano acotado por $x = 0$ y $x = l$. Por lo que,

$$\delta E = - \int_0^l K\nu \delta x \, dx$$

y

$$\delta S = \int_0^l R \frac{\nu}{N_A} \frac{\partial \delta x}{\partial x} \delta x \, dx = - \frac{R}{N_A} \int_0^l \frac{\partial \nu}{\partial x} \delta x \, dx$$



donde R es la constante universal de los gases ideales y N_A representa el número de Avogadro. La relación $\frac{R}{N_A}$ es equivalente a la constante de Boltzmann k_B .

Debido a la condición de equilibrio se debe verificar que

$$-Kv + k_B T \frac{\partial v}{\partial x} = 0. \quad (\text{A.1})$$

Esta ecuación permite encontrar una expresión para el coeficiente de difusión de una sustancia suspendida en un líquido.

Por otro lado, Einstein propuso que una de manera de pensar el proceso de difusión es como el resultado de los movimientos irregulares de las partículas provocado por el movimiento térmico molecular:

Suponiendo que las partículas tienen forma esférica de radio a y que el líquido tiene coeficiente de viscosidad η , la fuerza K imparte sobre las partículas una velocidad

$$\frac{K}{6\pi\eta a}$$

y pensándolo por unidad de área por unidad de tiempo

$$\frac{K}{6\pi\eta a} v.$$

Si D el coeficiente de difusión de la sustancia y μ la masa de una partícula, como resultado de la difusión pasarán a través de una unidad de área en una unidad de tiempo

$$-D \frac{\partial (\mu v)}{\partial x} \text{ gramos}$$

o bien

$$-D \frac{\partial v}{\partial x} \text{ partículas}$$

y como tienen que estar en equilibrio dinámico

$$\frac{vK}{6\pi\eta a} - D \frac{\partial v}{\partial x} = 0. \quad (\text{A.2})$$

Por lo tanto, considerando (A.1) y (A.2), se obtiene la expresión para el coeficiente de difusión es

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta a}.$$

Apéndice B

Proceso de Wiener

Definiciones

Antes de comenzar a trabajar con el Proceso de Wiener es necesario dar algunas definiciones: Se dice que X es una variable estocástica si verifica que:

- $X \in \Omega$, donde Ω es el conjunto (espacio muestral) de todos los posibles estados o espacio de fases.
- Existe una distribución de probabilidad $\rho(x)$ sobre el conjunto Ω que verifica

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx = 1.$$

De esta manera, la probabilidad de que la variable X tenga un valor entre x y $x + dx$ es $\rho(x) dx$

Una realización estocástica Y es una función de dos variables: la variable estocástica X y del tiempo t . Es decir, es de la forma $Y = Z(X, t)$ con $Z : \Omega \times \mathbb{R}_{\geq 0} \rightarrow \mathbb{R}$. Al conjunto de todas las realizaciones se lo llama proceso estocástico.



Proceso de Wiener

X es una variable aleatoria gaussiana de media μ y varianza σ^2 si su función densidad de probabilidad viene dada por

$$\rho(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2} \quad (\text{B.1})$$

con la siguiente notación $X \sim N(\mu, \sigma^2)$.

Un proceso de Wiener $W(t)$, con $t \geq 0$ es un proceso estocástico que verifica

1. $W(0) = 0$ con probabilidad 1.
2. $W(t) - W(s) \sim N(0, \sigma^2(t-s))$ para todo $t \geq s \geq 0$.
3. $W(t+a) - W(t) \forall t \forall a$ es independiente de cualquier $W(s)$ con $0 \leq s < t$.
4. $W(t+\tau) - W(t)$ es independiente de $W(t)$ para todo $\tau > 0$.
5. $\langle W(t) W(s) \rangle = \sigma^2 \min(t, s)$.
6. Para casi todo ω , la trayectoria $t \mapsto W(t, \omega)$ no es diferenciable en ningún punto y es de variación infinita en cada subintervalo¹.

De esta definición se tiene en particular que $\langle W(t) \rangle = 0$ y $\langle W(t)^2 \rangle = \sigma^2 t$ para todo $t \geq 0$.

Ruido blanco y proceso de Wiener

Tal como se mencionó en la sección 2.3.2, el modelo que represente al ruido blanco $\xi(t)$ debe tener media 0 y los valores estar correlacionados de manera proporcional a la Delta de Dirac, es decir,

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = 2\eta k_B T \delta(t_2 - t_1)$$

¹Se dice que una función f es de variación infinita si dada una partición de n elementos de un intervalo $[a, b]$, el conjunto conformado por $\sum_{i=1}^n |f(x_i) - f(x_{i-1})|$ no es acotado.

Entonces, la varianza de este ruido blanco es independiente del tiempo y diverge pues

$$\begin{aligned} V(\xi(t)) &= \langle \xi(t)^2 \rangle - \langle \xi(t) \rangle^2 \\ &= \langle \xi(t)^2 \rangle \\ &= 2\eta k_B T \delta(0) \end{aligned}$$

Teniendo en cuentas estas definiciones, al Ruido Gaussiano Blanco se lo puede tratar como la derivada del proceso de Wiener [34, 70, 71], aún cuando este proceso no es diferenciable, es decir,

$$\dot{W}(t) \equiv \xi(t) \text{ o bien } W(t) = \int_0^t \xi(t') dt'.$$

En otras palabras, se lo puede pensar como un modelo para el desplazamiento de una partícula Browniana a partir de una determinada posición en $t = 0$, tal como se muestra en la figura B.1.

Esto se debe a que:

$$\diamond \langle \xi(t) \rangle = \langle \dot{W}(t) \rangle = \frac{\partial}{\partial t} \langle W(t) \rangle = 0$$

$$\diamond \langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = -\frac{\partial^2}{\partial (t_1 - t_2)^2} \langle W(t_1) W(t_2) \rangle$$

La idea de este último ítem surge del hecho que $\langle W(t_1) W(t_2) \rangle = \sigma^2 \min(t_1, t_2)$ y la función $\min(t_1, t_2)$, a t_1 fijo, tiene la forma

$$\min(t_1, t_2) = \begin{cases} t_2, & \text{si } t_1 - t_2 > 0 \\ t_1 = t_2, & \text{si } t_1 - t_2 = 0 \\ t_1, & \text{si } t_1 - t_2 < 0 \end{cases}$$

representada en la figura B.2.

Luego, si se considera la función $-\min(t_1, t_2)$, ésta resulta ser una función rampa (ver figura B.3)

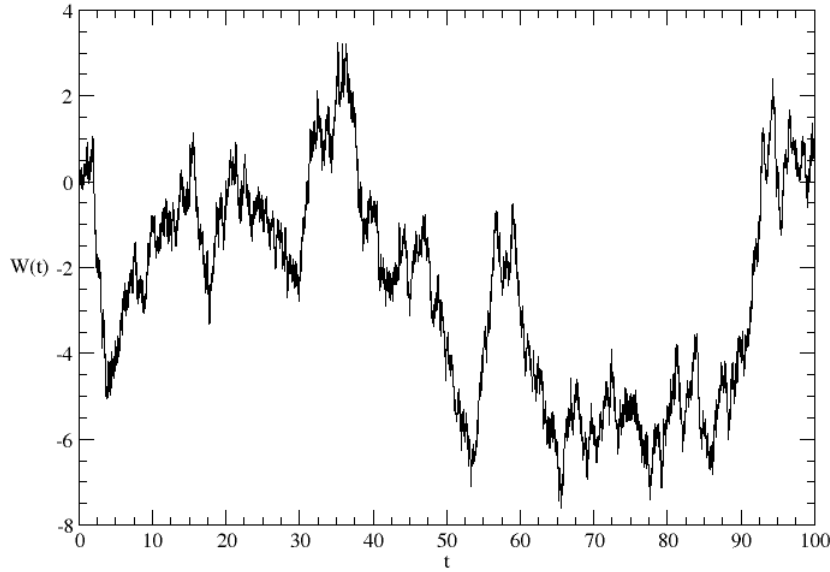


Figura B.1: Una realización típica del Proceso de Wiener realizado con una caminata aleatoria (*random walk*).

Por lo tanto, si se deriva la función rampa se obtiene la función escalón de Heaviside² que, a la vez, su derivada es la Delta de Dirac. En pocas palabras, la derivada segunda de la función – mín (t_1, t_2) resulta ser la Delta de Dirac.

Luego,

$$\langle \xi(t_1) \xi(t_2) \rangle = \sigma^2 \delta(t_2 - t_1).$$

Por lo que el parámetro σ^2 , que define al proceso de Wiener, es equivalente a $2\eta k_B T$.

²La función escalón de Heaviside está definida de la siguiente manera:

$$H(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \\ 1 & \text{si } x \geq 0 \end{cases}$$

y verifica que $H'(x - a) = \delta(x - a)$.

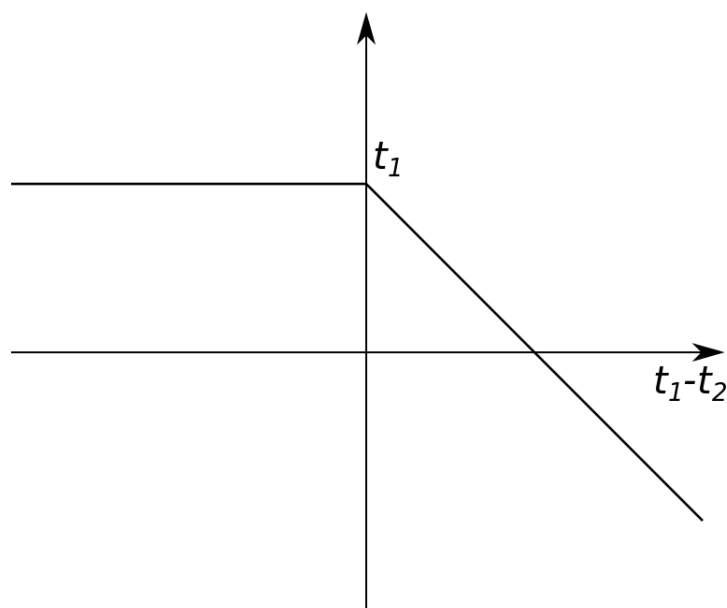


Figura B.2: Gráfico de la función $\min(t_1, t_2)$ con t_1 fijo.

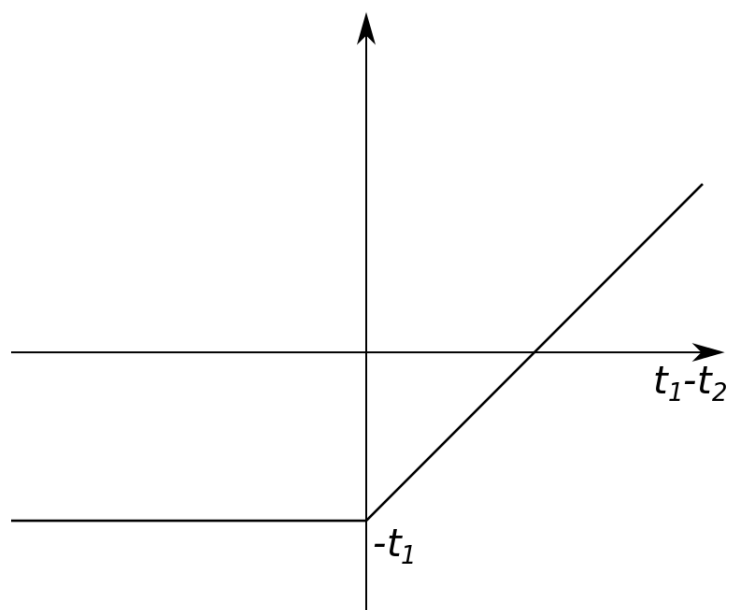


Figura B.3: Gráfico de la función $-\min(t_1, t_2)$ con t_1 fijo. Equivalente a la gráfica de una función rampa.

Apéndice C

Inclusión del Carozo Duro

Debido a que se trabaja con un anillo unidimensional, no hay posibilidad de que las partículas se “sobrepasen” unas a otras. En otras palabras, las partículas no se interpenetran por lo que el orden relativo entre ellas se preserva en el anillo durante todo el proceso (ver figura 3.1). En otras palabras, luego de la partícula 1 se encuentra la partícula 2 y detrás de ella la partícula 3, así sucesivamente hasta la partícula N con la convención de que la partícula $N + 1$ es la partícula 1.

Sin embargo, podría suceder que durante el proceso de simulación dos partículas intercambian su posición relativa en el anillo, es decir, se *interpenetran*, contradiciendo lo dicho en el párrafo anterior. Ahora bien, si el acoplamiento entre ellas es grande (es decir, Π_k grandes) no es usual que ocurran estos eventos. Sin embargo, para valores pequeños de acoplamiento es altamente probable que si sucedan.

Una posible manera para evitar que suceda la interpenetración es agregar al sistema una condición de *carozo duro*, es decir, suponiendo que las partículas tienen radio r y X_i y X_{i+1} representan las posiciones del centro de masa de las partículas i e $i + 1$ respectivamente, si para algún tiempo t de integración

$$|X_i(t) - X_{i+1}(t)| \leq 2r$$

se produce una colisión elástica (ver figura C.1). Pero esto puede ser computacionalmente costoso debido a que podría suceder que luego de un paso de integra-



ción cambien de posición relativa pero la distancia es mayor a $2r$ por lo que se debería regresar al paso anterior y repetirlo hasta que la distancia sea mayor a $2r$ y mantengan su posición relativa.

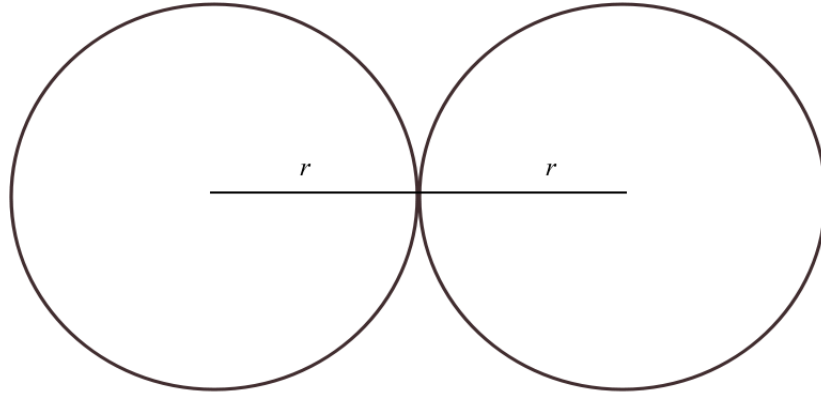


Figura C.1: Esquema de dos partículas de radio r

No obstante, existe una manera sencilla para considerar el carozo duro: si se suponen que las partículas son puntuales, tienen la misma masa y si en el paso de integración t las partículas intercambian sus posiciones relativas se considera que realizaron un choque elástico y por lo tanto, debido a la conservación de la cantidad de movimiento, las partículas realizan un intercambio de velocidades. En conclusión, si en algún momento las partículas i e $i + 1$ cambian de orden relativo, este cambio se lo considera como un choque elástico y alcanza con renombrar las partículas para remediar esta situación.

En la figura C.2 se muestran en (a) las simulaciones para ocho partículas libres no interactuantes salvo quizás choques elásticos y en (b) se muestra una situación similar incluyendo ruido blanco.

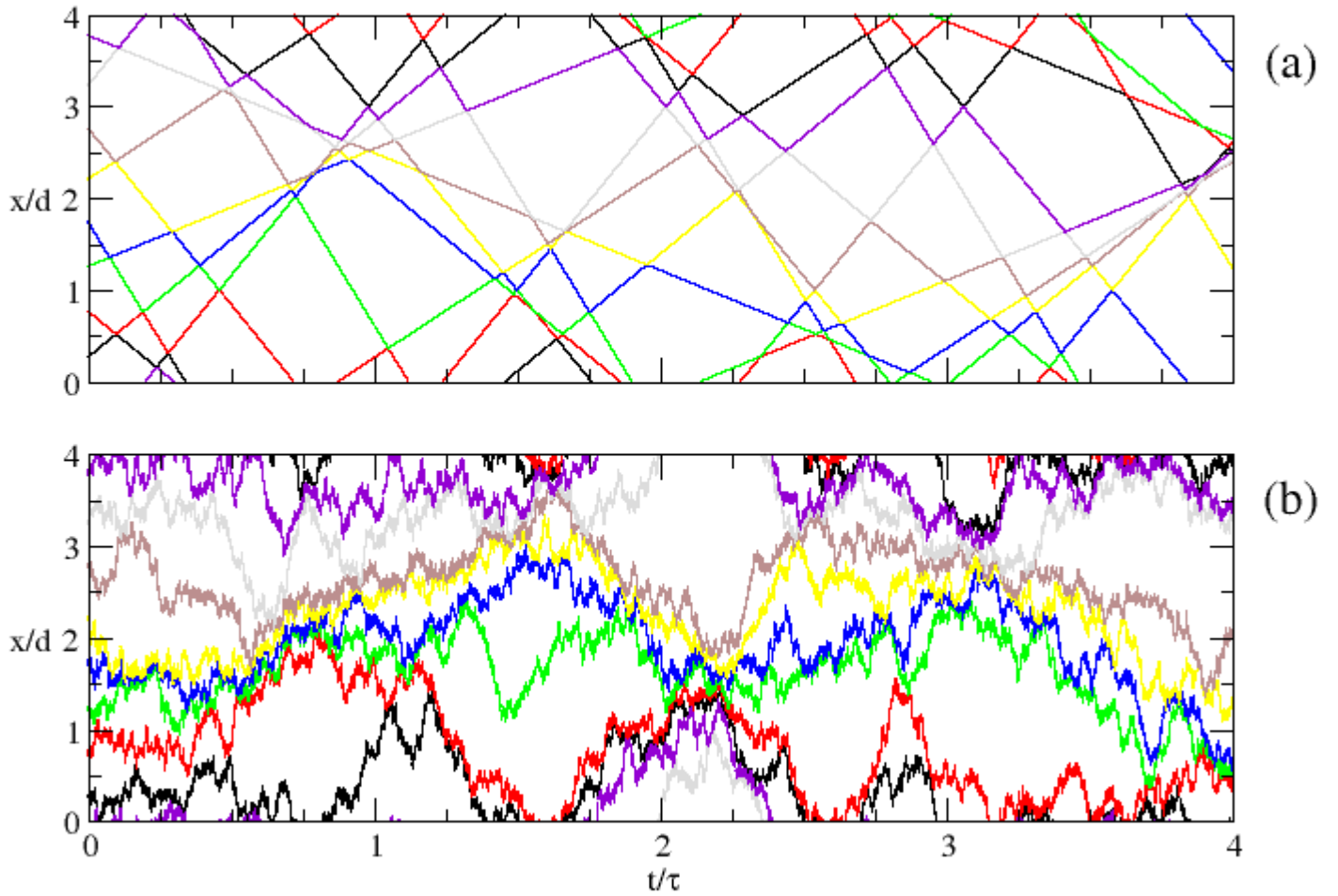


Figura C.2: (a) Simulación para ocho partículas no interactuantes sin que sean afectadas por un forzante externo. (b) Simulación para ocho partículas no interactuantes con ruido blanco.

Bibliografía

- [1] P. Reimann, *Physics Reports* **361**, 57-265, (2002).
- [2] P. Hänggi and R. Bartussek, in *Nonlinear Physics and Complex Systems-Current Status and Future Trends*, edited by J. Parisi et al., *Lecture Notes in Physics*, Springer, Berlin, Vol. **476**, 294-308 , (1996).
- [3] S. Savel'ev, F. Marchesoni, P. Hänggi and F. Nori, *Europhysics Letters* **67** (2), 179-185, (2004).
- [4] T. Duke, *Modelling Motor Protein Systems in Physics of Bio-Molecules and Cells* (H. Flyvbjerg et al.), Springer-Verlag, New York, (2002).
- [5] M. von Smoluchowski, *Physikalische Zeitschrift* **XIII**, 1069-1080, (1912).
- [6] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands, *The Feynman Lectures in Physics*, Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, (1963).
- [7] J. M. Parrondo and B. Jimenez de Cisneros, *Applied Physics A: Materials Science & Processing* **75**, 179, (2002).
- [8] R. D. Astumian and M. Bier, *Physical Review Letter* **72**, 1766, (1994).
- [9] G. Oster and H. Wang, *Trends in Cell Biology* **13**, 114, (2003).
- [10] J. L. Mateos, *Physica* **A351**, 79, (2005).
- [11] M. Downton, M. Zuckermannn, E. Craig, M. Plishke and H. Linke, *Physical Review* **E73**, 011909, (2006).



- [12] Ping Xie, *Journal of Physics: Condensed Matter* **21**, 375108, (2009).
- [13] J. Bader, R. Hammond, S. Henck, M. Deem, G. McDermott, J. Bustillo, J. Simpson, G. Mulhem and J. Rothberg, *Proceedings of the National Academy of Sciences* **96** 23, 13165-13169, (1999).
- [14] Li Rui Zi, G. R. Liu, Jongyoon Han, Yu Zong Chen, Jian-Sheng Wang and Nicholas G. Hadjiconstantinou, *Analytical and Bioanalytical Chemistry* **394** 2, 427-435, (2009).
- [15] S. Matthias and Frank Müller, *Nature* **424** , 53-57, (2003).
- [16] I. Kosztin and K. Schulten, *Physical Review Letters* **93**, 238102, (2004).
- [17] Gao Tian-Fu, Zheng Zhi-Gang and Chen Jin-Can, *Chinese Physics* **B22** 8, 080502, (2013).
- [18] P. Hänggi and F. Marchesoni, *Review of Modern Physics* **81**, 387, (2010).
- [19] Y. I. Frenkel and T. Kontorova, *Zhurnal Éksperimental'noï i Teoreticheskoi Fiziki* **8**, 1340, (1938).
- [20] O. M. Braun and Y. S. Kivshar, *The Frenkel-Kontorova Model, Concepts, Methods and Applications*. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, (2004). También en O. M. Braun and Y. S. Kivshar, *Physics Reports* **306**, 1-108, (1998).
- [21] B. McNamara and K. Wiesenfeld, *Physical Review* **A39**, 4854-4869, (1989).
- [22] M. F. Carusela, A. J. Fendrik and L. Romanelli, *Physica* **A388**, 4017-4024, (2009).
- [23] A. Fiasconaro, B. Spagnolo and S. Boccaletti, *Physical Review* **E72**, 061110, (2005).
- [24] M. Borromeo, S. Giuseppeponi and F. Marchesoni, *Physical Review* **E74**, 031121, (2006).
- [25] Bidhan Chandra Bag, Chin-Kung Hu, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, P02003, (2009).

- [26] Yu-Hui Luo and Chong-Wei Xie, *Physics Letters* **A373**, 3217-3222, (2009).
- [27] L. Viana and V. Romero-Rochín, *Physica* **D 168-169**, 193-204, (2002).
- [28] R. M. da Silva, C. C. de Souza and S. Coutinho, *Physical Review* **E78**, 061131, (2008).
- [29] AI Bao-Quan, XIE Hui-Zhang and LIU Liang-Gang, *Chinese Physical Letters* **22** 11, 2772, (2005).
- [30] J. Buceta, J. Parrondo, C. Van den Broeck and F. de la Rubia, *Physical Review* **E 61** 6, 6287-623, (2000).
- [31] R. Phillips, J. Kondev, J. Theriot, H. Garcia, *Physical Biology of the Cell*. Garland Science, Tayler & Francis Group, LLC, New York, (2013).
- [32] B. Alberts, A. Johnson, J. Lewis, M. Raff, K. Roberts, P. Walter, *Molecular Biology of the Cell*, Garland Science, Tayler & Francis Group, LLC, New York, (2008).
- [33] R. Brown, *Philosophical Magazine Series 2* , Vol. 4 Issue 21, 161-173, (1828).
- [34] D. Lemons, *An Introduction to Stochastic Processes in Physics*, The Johns Hopkins University Press, Maryland, (2002).
- [35] R. D. Astumian, *Science* **276**, 917-922, (1997).
- [36] A. Einstein, *Annalen der Physik* Vol. **17**, 549-560, (1905).
- [37] P. Langevin, *Comptes Rendus Académie des Sciences Paris* **146**, 530-533, (1908). Traduccido por A. Gythiel, *American Journal of Physics* **65**, 1079-1081, (1997).
- [38] V. Berdichevsky and M. Gitterman, *Physica* **A249**, 88-95, (1998).
- [39] I. Derényi, *Applied Physics* **A75**, 217-222, (2002).
- [40] Chengcheng Liu, Jie Ju, Yongmei Zheng and Lei Jiang, *ACS Nano* **8** 2, 1321-1329, (2014).



- [41] R. Bartussek, P. Hänggi and J. G. Kissner, *Europhysics Letters* **28** (7), 459-464, (1994).
- [42] L. Gammaitoni, P. Hänggi, P. Jung and F. Marchesoni, *The European Physical Journal* **B69**, 1-3, (2009).
- [43] H. Linke, M. Downton and M. Zuckermann, *Chaos* **15**, 026111, (2005).
- [44] P. Hänggi and P. Jung, *Advances in Chemical Physics* **89**, 239-326, (1995).
- [45] S. Bahar, A. Neiman, P. Jung, J. Kurths, L. Schimansky-Geier and K. Showalter, *Chaos* **21**, 047501, (2011).
- [46] F. Moss, D. Pierson and D. O’Gorman, *International Journal of Bifurcation and Chaos* **4** 6, 1393-1397, (1994).
- [47] J. Howard, *Mechanics of Motor Protein in Physics of Bio-Molecules and Cells* (H. Flyvbjerg et al.), Springer-Verlag, New York, (2002).
- [48] J. Mateos and F.R. Alatríste, *Chaos* **21**, 047503, (2011).
- [49] P. Gailey, A. Neiman, J. Collins and F. Moss, *Physical Review Letters* **79** 23, 4701-4704, (1997).
- [50] J.M. Porrà, *Physical Review* **E55** 6, 6533-6539, (1997).
- [51] R. Benzi, G. Parisi, A. Sutera and A. Vulpiani, *Tellus* **34**, 10-16, (1982).
- [52] C. Nicolis and G. Nicolis, *Tellus* **33**, 225-234, (1981).
- [53] H. Braun, M. Christl, S. Rahmstorf, A. Ganopolski, A. Mangini, C. Kubatzki, K. Roth and B. Kremer, *Nature* **438**, 208-211, (2005).
- [54] R. De Leo and S. Demelio, *Communications in Applied and Industrial Mathematics*, DOI:10.1687/journal.caim.366 (2011).
- [55] A. V. Ustinov and M. Cirillo and B. A. Malomed, *Physical Review* **B47**, 8357-8360, (1993).
- [56] T. Strunz and F-J. Elmer, *Physical Review* **E58**, 1601-1611, (1998).

- [57] H. Yoshino, T. Novawa and B. Kim, Prog. Theor. Phys. Suppl. **184**, 153-171, (2010).
- [58] A. J. Fendrik, L. Romanelli and R. P. J. Perazzo, Physica **A359**, 75-84, (2006).
- [59] A. J. Fendrik, L. Romanelli and R. P. J. Perazzo, Physica **A368**, 7-15, (2006).
- [60] D. Dan, A.M. Jayannavar and G. I. Menon, Physica **A318**, 40-47, (2003).
- [61] Hai-Yan Wang and Jing-Dong Bao, Physica **A374**, 33-40, (2007).
- [62] Z. Csahók, F. Family and T. Vicsek, Physical Review **E75** 5, 5179-5183, (1997).
- [63] S. Savel'ev, F. Marchesoni and F. Nori, Physical Review Letters **91** 1, 010601, (2003).
- [64] F. Marchesoni, Physical Review **E56**, 2492 (1997).
- [65] U. Vincent, B. Nana-Nbendjo and P. McClintock, Physical Review **E87**, 022913, (2013).
- [66] S. Flach, O. Yevtushenko and Y. Zolotaryuk, Physical Review Letters **84** 11, 2358-2361, (2000).
- [67] J.F. Chauwin, A. Ajdari and J. Prost, Europhysics Letters **32**, 373-378, (1995).
- [68] M. Bier and R.D. Astumian, Physical Review Letters **76**, 4277-4280, (1996).
- [69] B. Dybiec, Physical Review **E78**, 061120, (2008).
- [70] L. Ridolfi, P. D'Odorico and F. Laio, *Noise-induced Phenomena in the environmental Sciences.*, Cambridge University Press, New York, (2011).
- [71] J. Martínez Barbento and J.G. Villalón, *Introducción al Cálculo Estocástico aplicado a la modelación econímoco-financiero-actuarial.*, NetBiblo, Coruña, (2003).
- [72] A. Giuliani, A. Colosimo, R. Benigni and J. Zbilut, Physics Letters **A247**, 47-52, (1998).



- [73] B. McNamara, K. Wiesenfeld and R. Roy, *Physical Review Letter* **60** 25, 2626-2629, (1988).
- [74] R. Hammond, J. Bader, S. Henck, M. Deem, G. McDermott, J. Bustillo and J. Rothberg, *Electrophoresis* **21**, 74-80, (2000).
- [75] J. Bader, M. Deem, R. Hammond, S. Henck, J. Simpson and J. Rothberg, *Applied Physics* **A75** 2, 275-278, (2002).
- [76] J. Polson, B. Bylhouwerm, M. Zuckermann, A. Horton and W. Scott, *Physical Review* **E82**, 051931, (2010).
- [77] J. E. Lennard-Jones, *The Proceeding of The Physical Society* **43** 461, (1931).

Índice alfabético

Órbitas, 31

 Sistema Defectuoso, 34

 Sistema Perfecto, 32

Ecuación de Langevin, 9

Modelo de Frenkel Kontorowa, 20

Movimiento Browniano, 6

Proceso de Wiener, 63

Ratchet, 11

Resonancia Estocástica, 16

Ruido Blanco, 19, 28, 49